

BEITRÄGE ZUR ATOM-PHOTON WECHSELWIRKUNG IN
NIEDRIGER ORDNUNG DER WEISSKOPF-WIGNER THEORIE

1977
—

Eugen Grimm
—

BEITRÄGE ZUR ATOM-PHOTON WECHSELWIRKUNG IN NIEDRIGER
ORDNUNG DER WEISSKOPF-WIGNER THEORIE

Inaugural-Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
des Fachbereichs Physik
der Ludwig-Maximilians-Universität
München

vorgelegt von
Eugen Grimm
München
1976

1. Berichterstatter: Priv. Doz. Dr. V. Ernst

2. Berichterstatter: Prof. Dr. H. Walther

Tag der mündlichen Prüfung: 23. Juni 1977



Für Jutta

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
I. Teil: Feldtheoretisches zur Weisskopf-Wigner Näherung	8
1. Fockräume der Elektronen und Photonen	8
a) Der Diracoperator	8
b) Fermionenfockraum für gebundene Elektronen	12
c) Fockraum der transversalen Photonen	19
2. Die Weisskopf-Wignersche Näherungsmethode	25
a) Das Atom-Photon System	25
b) Ein Existenzsatz für die WWN	27
c) Die Weisskopf-Wignersche Näherungsmethode	29
II. Teil: Das entartete Zwei-Niveau Atom in Wechselwirkung mit einem Photon	34
1. Zur Weisskopf-Wigner Theorie eines n-Niveau Atoms	34
a) Der Wechselwirkungsoperator H_I^1	35
b) Konstanz des kontinuierlichen Spektrums von H_I^1	39
c) Zeitentwicklung und Resolvente	42
2. Weisskopf-Wigner Theorie eines entarteten Zwei-Niveau Atoms	46
a) Rotationsinvarianz von H_I^1	46
b) Gebundene Photonen	52
c) Emissionslinie im Fall $\Delta \gg \varepsilon'_{ab}$	58
d) Vernachlässigung der Spinflipübergänge	62

III. Teil: Analytische Berechnung von WW-Funktionen für relativistische wasserstoffähnliche Atome	64
1. Einige Bezeichnungen	64
2. Berechnung von $M^*(a, b; k)$ und $m_{c, d}^{(a, b)}(k)$	67
3. Berechnung der Radialfunktionen $F_L(a, b; k)$	75
IV. Teil: Numerische Rechnungen	80
1. Erläuterungen zur numerischen Auswertung	80
2. Das Algolprogramm	87
3. Tabelle und Zeichnungen	97
Literatur	111

Zusammenfassung

Innerhalb des Weisskopf-Wignerschen Näherungsverfahrens wird die Wechselwirkung von einem entarteten Zwei-Niveau Atom mit einem Photon untersucht. Es zeigt sich, daß der Gesamthamiltonoperator $H_I = H_I^0 + H_I'$ dasselbe kontinuierliche Spektrum wie der freie Hamiltonoperator H_I^0 besitzt, und daß für drehinvariante Atompotentiale H_I auch drehinvariant ist. Außerdem hat H_I immer einen echten Eigenzustand, der zu einem gewissen Teil aus gebundenen Photonen besteht. Der gewöhnliche Absorptions- und/oder Emissionsprozess findet nur dann statt, wenn die Energiedifferenz der beiden Niveaus, $E_b^0 - E_a^0$, sehr viel größer als eine gewisse positive Schwellenergie ϵ'_{ab} ausfällt; für $E_b^0 - E_a^0 < \epsilon'_{ab}$ dagegen nimmt das System einen zweiten Eigenzustand an. Linienbreiten, Linienverschiebungen und Schwellenergien ergeben sich so, wie man es gemäß der statistischen Mittelung über die entarteten atomaren Zustände erwartet. Für das relativistische H-Atom werden die in solchen Theorien auftretenden Weisskopf-Wigner-Funktionen und Schwellenergien analytisch und numerisch berechnet.



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41555615_0094

Einleitung

Die Wechselwirkung von Atomen mit dem Strahlungsfeld bewirkt, daß die Spektrallinien von emittiertem Licht immer eine bestimmte Form, immer eine bestimmte endliche Breite, die nicht durch experimentelle Gegebenheiten festgelegt ist, besitzen. Die Theorie dieser natürlichen Linienbreite, die wohl auf Dirac [1] zurückgeht, ist durch die Arbeit von Weisskopf und Wigner [2] in der Literatur bekannt geworden.

Trotz der physikalisch vernünftigen Ergebnisse hatte man später Bedenken [3] gegen die Methode von Weisskopf und Wigner, insbesondere war und ist man auch heute noch der Meinung, daß sie zu divergenten Linienverschiebungen, die mit dem Lambshift in Verbindung gebracht werden, führt [3-6]. Deshalb wurden andere Verfahren, wie z.B. die von der Störungstheorie ausgehende Heitler-Ma Methode [7,8], oder die Projektionsmethode der Greenfunktion nach Goldberger und Watson [6,8,9], entwickelt.

Die Methode von Weisskopf und Wigner, basierend auf der Vorstellung, daß von einem wechselwirkenden System nur einige wenige Zustände von allen möglichen Zuständen für bestimmte Fragestellungen physikalisch "wichtig" sind, ist in der Literatur nicht sehr eingehend behandelt worden [4,10,11]. Erst vor kurzem wurde sie für die Wechselwirkung eines Atoms A mit dem gequantelten Strahlungsfeld R zu einem allgemeinen, systematischen Näherungsverfahren, der Weisskopf-Wigner Näherung (WWN), dessen Ordnungsstruktur nicht durch Potenzen der Kopplungskonstanten regiert wird, ausgebaut [12,13].

Die niedrigste nichttriviale Ordnung in diesem Schema ist ein Zwei-Niveau Atom in Wechselwirkung mit höchstens einem Photon.

Diese für die Quantenoptik fundamentale, exakt lösbare Theorie, die die alten Theorien von spontaner Emission [2] und Resonanzfluoreszenz [14] umfaßt, war und ist Gegenstand vieler Untersuchungen [15-18]. Sie kann folgendermaßen charakterisiert werden: Ist das Atom A im Zustand $u_b(\underline{x})$ mit der Energie E_b^0 , so sei kein Photon vorhanden, ist A im Zustand $u_a(\underline{x})$ mit der Energie E_a^0 , so sei genau ein Photon vorhanden, und für $E_b^0 > E_a^0$ kann A nur einen Übergang $u_b(\underline{x}) \rightarrow u_a(\underline{x})$ unter Emission eines Photons und einen Übergang $u_a(\underline{x}) \rightarrow u_b(\underline{x})$ unter Absorption eines Photons machen.

Will man in dieser Theorie Lebensdauer und Energieverschiebung für ein Atom mit entarteten Zuständen, z.B. für das Wasserstoffatom [19], berechnen, so ist zusätzlich das statistische Argument "Mittelung über Anfangsspins und Summation über Endspins" erforderlich, um diese zusätzlichen nicht gemessenen Freiheitsgrade zu eliminieren. Eine konsistente Theorie eines entarteten Zwei-Niveau Atoms in Wechselwirkung mit einem Photon muß jedoch diese Entartung von Anfang an berücksichtigen; unseres Wissens scheint nur Mower [9] dieses Problem mit der mathematisch sehr unklaren Goldberger-Watson Methode angeschnitten, jedoch nicht durchdiskutiert zu haben.

Ein Teil dieser Arbeit befaßt sich mit der WW Theorie eines entarteten Zwei-Niveau Atoms, wobei die Entartung der Niveaus eine Drehimpulsentartung sein soll, das in Wechselwirkung mit höchstens einem Photon steht. Da ein entartetes Zwei-Niveau Atom ein Spezialfall eines n-Niveau Atoms, $n < \infty$, ist, haben wir zuerst die WW Theorie eines n-Niveau Atoms untersucht. Eine solche WW Theorie stellt im Sinne der Ordnungshierarchie der WWN eine höhere Ordnung als die des gewöhnlichen Zwei-Niveau Atoms dar.

Sie ist daher auch ein erster Schritt, um zu Aussagen und Eigenschaften über höhere Ordnungen innerhalb des WW Verfahrens zu gelangen.

Die WW Theorie eines entarteten Zwei-Niveau Atoms A kann wie folgt beschrieben werden. Seien E_a^0 und E_b^0 die beiden entarteten Energieniveaus und j_a und j_b die entsprechenden Quantenzahlen des Gesamtdrehimpulses, so bezeichnen wir die $(2j_a+1)$ Eigenzustände zu E_a^0 mit $u_{a\mu_a}(\underline{x})$, $\mu_a \in J_a := \{-j_a, -j_a+1, \dots, +j_a\}$, und die $(2j_b+1)$ Eigenzustände zu E_b^0 mit $u_{b\mu_b}(\underline{x})$, $\mu_b \in J_b := \{-j_b, -j_b+1, \dots, +j_b\}$. Indem wir zulassen, daß A Übergänge $u_{a\mu_a}(\underline{x}) \rightleftharpoons u_{b\mu_b}(\underline{x})$ unter Emission oder Absorption eines Photons machen kann, bedeutet die Annahme $E_a^0 \leq E_b^0$ keine Ausschließung "virtueller" Übergänge [18]. Außerdem ermöglichen wir A Übergänge zwischen den jeweils entarteten Niveaus $u_{a\mu_a}(\underline{x}) \rightleftharpoons u_{a\mu'_a}(\underline{x})$, $\mu_a, \mu'_a \in J_a$, bzw. $u_{b\mu_b}(\underline{x}) \rightleftharpoons u_{b\mu'_b}(\underline{x})$, $\mu_b, \mu'_b \in J_b$, unter Emission oder Absorption eines Photons. Damit haben wir für $\mu_a \neq \mu'_a$ bzw. $\mu_b \neq \mu'_b$ Spinflipübergänge und für $\mu_a = \mu'_a$ bzw. $\mu_b = \mu'_b$ die Spezialfälle der "Selbstwechselwirkung" der Zustände $u_{a\mu_a}(\underline{x})$ bzw. $u_{b\mu_b}(\underline{x})$ [18].

Eine solche Theorie, bzw. deren Verallgemeinerung auf die Wechselwirkung von vielen Photonen mit einem entarteten Zwei-Niveau Atom, könnte auch für die Erklärung des dynamischen Starkeffektes [20] von Bedeutung sein, da bei den meisten Experimenten zum dynamischen Starkeffekt der Hyperfeinübergang der D_2 -Linie der entarteten Zustände $^2P_{3/2}(F=3)$, $^2S_{1/2}(F'=2)$ des Natriums beobachtet wird.

Innerhalb der beschriebenen Theorie erhalten wir die folgenden Ergebnisse:

1. Wir können allgemein zeigen, daß der Wechselwirkungs-

hamiltonoperator H_I^1 für eine n-Niveau WW Theorie ein entarteter Operator und somit aus der Spurklasse von Operatoren [21] ist. Daraus folgt, daß der Gesamthamiltonoperator $H_I = H_I^0 + H_I^1$ und der freie Hamiltonoperator H_I^0 für dieses System das gleiche kontinuierliche Spektrum besitzen. Diese Konstanz des kontinuierlichen Spektrums ist physikalisch von Bedeutung, so z.B. lassen sie Zweifel an der Anwendbarkeit der gewöhnlichen Störungstheorie und des Renormierungsverfahrens zur Berechnung von Niveaushiftungen aufkommen [13].

2. Der Hamiltonoperator H_I , der die Dynamik unseres Systems aus einem entarteten Zwei-Niveau Atom und einem Photon beschreibt, ändert sich nicht bei Drehungen des Koordinatensystems. Diese Drehinvarianz überrascht etwas, denn sie bedeutet, daß die Drehimpulsentartung des freien Hamiltonoperators H_I^0 durch die Wechselwirkung H_I^1 nicht aufgehoben werden kann, und daß das Spektrum von $H_I = H_I^0 + H_I^1$ dieselbe Drehimpulsentartung wie dasjenige von H_I^0 aufweist. Mögliche Eigenwerte von H_I müssen also $(2j_a+1)$ -fach bzw. $(2j_b+1)$ -fach entartet sein, auch ist eine entsprechende "Entartung" der Emissionslinien zu erwarten.

3. Der Hamiltonoperator H_I nach 2. hat immer einen $(2j_a+1)$ -fachen Eigenwert E_a . Falls der Energieabstand $\Delta := E_b^0 - E_a^0 \geq 0$ der beiden Niveaus kleiner ist als eine gewisse nur von den atomaren Zuständen abhängige "Schwellenenergie" ϵ'_{ab} , so hat H_I zusätzlich einen zweiten Eigenwert E_b , der $(2j_b+1)$ -fach entartet ist. Die zugehörigen $(2j_a+1)$ bzw. $(2j_b+1)$ linear unabhängigen Eigenzustände sind untrennbare Mischungen der Zustände $u_{a,\mu_a}(\underline{x})$, $u_{b,\mu_b}(\underline{x})$ und eines Photons. Dieses Photon muß man als ein gebundenes Photon [18] ansehen, denn, da es Teil eines echten Eigenzustandes

ist, kann es vom Atom weder abgestrahlt noch sonst irgendwie entfernt werden. Die Bindungsenergie, mit der dieses "Photonkleid" an das Atom gebunden ist, ist $-(E_a^0 - E_a)$ bzw. $-(E_b^0 - E_b)$.

4. Für $\Delta \gg \epsilon'_{ab}$ erlaubt das Atom-Photon System nach 2. die Abstrahlung eines Photons. Wir untersuchen seine Energieverteilung im Fernfeld für den Fall der spontanen Emission und stellen fest, daß alle vorkommenden Emissionslinien, die allen möglichen Übergängen $u_{b\mu_b}(\underline{x}) \rightarrow u_{a\mu_a}(\underline{x})$ zugeordnet sind, in einer sehr guten Sekundärnäherung Lorentzlinien sind. Als Folge der Drehinvarianz von H_I haben sie alle dieselbe Linienbreite und dieselbe Linienverschiebung, so daß also nur eine Lorentzlinie auftritt. Da wir den Anfangszustand auf $(2j_b+1)$ linear unabhängige Arten präparieren können, ist diese Emissionslinie $(2j_b+1)$ -fach "entartet". Wir weisen noch darauf hin, daß die ^{räumliche} Strahlungscharakteristik dagegen von der Art des Überganges abhängt.

5. Bei Vernachlässigung der Wechselwirkung der entarteten Niveaus jeweils untereinander, das ist ein Verbot der Übergänge $u_{a\mu_a}(\underline{x}) \rightarrow u_{a\mu'_a}(\underline{x})$, $\mu_a, \mu'_a \in J_a$, und $u_{b\mu_b}(\underline{x}) \rightarrow u_{b\mu'_b}(\underline{x})$, $\mu_b, \mu'_b \in J_b$, zerfällt der Hamiltonoperator H_I in die orthogonale Summe der zwei Hamiltonoperatoren H_I^{ba} und H_I^{ab} , die unabhängige Theorien auf orthogonalen Hilberträumen beschreiben. H_I^{ba} behandelt die Übergänge $u_{b\mu_b}(\underline{x}) \rightarrow u_{a\mu_a}(\underline{x})$, $\mu_b \in J_b, \mu_a \in J_a$, bei Emission eines Photons und die Übergänge $u_{a\mu_a}(\underline{x}) \rightarrow u_{b\mu_b}(\underline{x}) \rightarrow u_{a\mu'_a}(\underline{x})$, $\mu_a, \mu'_a \in J_a, \mu_b \in J_b$, unter Absorption-Reemission eines Photons. H_I^{ab} behandelt die "umgekehrten", wegen $E_a^0 \leq E_b^0$ immer "virtuellen", Übergänge $u_{a\mu_a}(\underline{x}) \rightarrow u_{b\mu_b}(\underline{x})$ unter Emission eines Photons und $u_{b\mu_b}(\underline{x}) \rightarrow u_{a\mu_a}(\underline{x})$ unter Absorption eines Photons.

Der Operator H_I^{ab} hat immer einen $(2j_a+1)$ -fachen Eigenwert, und

für $\Delta < \bar{\epsilon}_{ab}$ - die Schwellenergie $\bar{\epsilon}_{ab}$ ist im allgemeinen verschieden von ϵ'_{ab} - hat auch der Operator H_I^{ba} einen $(2j_b+1)$ -fachen Eigenwert. Diese Eigenwerte sind wie in 3. zu interpretieren. Für $\Delta \gg \bar{\epsilon}_{ab}$ beschreibt H_I^{ba} "normale" Übergänge, verbunden mit Emissionslinien, Linienbreiten und Lebensdauern [18]. Wir erhalten jetzt als exaktes Resultat, daß wie in 4. Linienbreiten, Linienverschiebungen und auch die Schwellenergie $\bar{\epsilon}_{ab}$ unabhängig von der Art des Überganges $u_{b,\mu_b}(\underline{x}) \rightarrow u_{a,\mu_a}(\underline{x})$ sind. Da in diesen Größen die einzelnen atomaren Zustände der entarteten Niveaus gemäß der statistischen Summationsprozedur auftreten, kann man jetzt die früher gemachte Miteinbeziehung der Spins zu ihrer numerischen Berechnung für das relativistische H-Atom [18,19] rechtfertigen: Ein entartetes Zwei-Niveau Atom verhält sich für diese Größen wie ein gewöhnliches Zwei-Niveau Atom mit entsprechend vorgenommener Mittelung-Summation über die entarteten Zustände.

Wir kommen jetzt noch einmal auf die zu Beginn erwähnte Divergenz der Linienverschiebungen zu sprechen. Da alle WW Theorien endlicher Ordnung existieren, d.h. durch selbstadjungierte Hamiltonoperatoren beschrieben werden [12], können in ihnen keine Unendlichkeiten auftreten; für die niedrigste Ordnung ist dies schon in früheren Arbeiten [1,22-24] festgestellt worden. Man muß sie deshalb auf unzulässige Sekundärnäherungen, wie z.B. auf die häufig benutzte Dipolnäherung, zurückführen [18]. Die tatsächlichen Zahlenwerte der Linienverschiebungen, die bis auf einen relativen Fehler von $\sim 1\%$ mit denen der Schwellenergien $\bar{\epsilon}_{ab}$ identisch sind, sind erst vor kurzem für die niedrigsten Zustände des relativistischen H-Atoms berechnet worden [18,19].

Im dritten und vierten Teil dieser Arbeit wollen wir diese

Rechnungen verallgemeinern. Für beliebige gebundene Zustände relativistischer wasserstoffähnlicher Atome berechnen wir analytisch die in allen WW Theorien vorkommenden WW-Funktionen $M^*(a, b; k)$ und $m_{c,d}^{(a,b)}(k)$. Für eine Reihe von Zuständen des H-Atoms wurden mit Hilfe dieser analytischen Ausdrücke die Funktionswerte der Funktionen $m(a, b; k)$ und $m(a, b; k)/k$ numerisch berechnet und graphisch aufgetragen. Außerdem wurden die Schwellenergien $\bar{\epsilon}_{ab}$ für eine Reihe von Zuständen numerisch berechnet. Sämtliche numerische Rechnungen wurden am Telefunken Rechner TR 440 des Leibniz Rechenzentrums in München durchgeführt.

Im ersten Teil dieser Arbeit erläutern wir etwas eingehender den feldtheoretischen Hintergrund der WWN. Besonderer Wert wird dabei im 1. Abschnitt auf die genauen Definitionen der Fockräume und der Feldoperatoren gelegt. Im 2. Abschnitt bringen wir einen leicht modifizierten Beweis des Existenzsatzes [12] und definieren dann die WWN. Abschnitt 1 und 2 des zweiten Teils behandeln die WW Theorien von einem n-Niveau Atom und von einem entarteten Zwei-Niveau Atom. Im dritten Teil werden, nachdem in Abschnitt 1 die notwendigen Bezeichnungen eingeführt wurden, in Abschnitt 2 die analytischen Berechnungen der WW-Funktionen und in Abschnitt 3 die der dazu benötigten Radialintegrale durchgeführt. Im vierten Teil werden in Abschnitt 1 die numerischen Auswertungen erläutert, in Abschnitt 2 das benutzte Algolprogramm aufgeführt und in Abschnitt 3 Tabelle und Zeichnungen wiedergegeben. Wir benutzen durchwegs die "natürlichen" Einheiten $\hbar=1$, $c=1$, $m_e=1$ (m_e =Ruhemasse des Elektrons).

I. Teil: Feldtheoretisches zur Weisskopf-Wigner Näherung

1. Fockräume der Elektronen und Photonen

In diesem Abschnitt werden wir zuerst einige mathematische Eigenschaften des Diracoperators aus der Literatur wiedergeben und dann den Fockraum über den (Unter-) Raum seiner gebundenen Zustände konstruieren. Der Punkt c) behandelt dann den Fockraum der transversalen Photonen. Auf beiden Fockräumen werden jeweils Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren und mit diesen die freien Hamiltonoperatoren definiert.

a) Der Diracoperator

Wir betrachten ein Einelektronen-Atom, das durch die Diracgleichung mit fest vorgegebenem (skalarem) Potential $V(\underline{x})$ beschrieben wird. Der damit verbundene formale Diracoperator H_D wirkt im Hilbertraum $\mathcal{H}_D = [L_2(\mathbb{R}^3)]^4$ der $\mathbb{C}^4$ -wertigen quadratintegrierbaren Funktionen

$$u: \underline{x} \mapsto u(\underline{x}) = \begin{pmatrix} u_1(\underline{x}) \\ u_2(\underline{x}) \\ u_3(\underline{x}) \\ u_4(\underline{x}) \end{pmatrix}, \quad (1.1)$$

wobei das Skalarprodukt durch

$$\langle u | v \rangle = \int d^3x \, u^\dagger(\underline{x}) \cdot v(\underline{x}), \quad u^\dagger(\underline{x}) \cdot v(\underline{x}) := \sum_{i=1}^4 u_i^*(\underline{x}) v_i(\underline{x}) \quad (1.2)$$

und die Norm durch

$$\|u\| = (\langle u | u \rangle)^{1/2} \quad (1.3)$$

gegeben sind. In den gewählten Einheiten hat H_D die Form

$$H_D = \underline{\alpha} \cdot \underline{p} + \beta + V(\underline{x}) \quad (1.4)$$

mit $\underline{p} = -i\nabla$. Für die 4x4-Diracmatrizen $\underline{\alpha}, \beta$ wählen wir die Darstellung

$$\underline{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \underline{\sigma} \\ \underline{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.5)$$

mit den Paulimatrizen

$$\underline{\sigma} = \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right). \quad (1.6)$$

Um dem formalen Diracoperator einen mathematisch exakten Sinn zu geben, um ihm Eigenschaften, wie z.B. Symmetrie, Selbstadjungiertheit etc. zuschreiben zu können, muß man seinen Definitionsbereich festlegen. Die folgenden Aussagen dazu entnehmen wir der mathematischen Literatur [25-29]. Sei $\mathbb{R}_0 = \mathbb{R} \setminus \{0\}$, und habe $V(\underline{x})$ bei $|\underline{x}| = 0$ eine Singularität. Sei V reellwertig und lokal quadratintegrierbar in $\mathbb{R}_0^3$, d.h. $V \in L_{2,loc}(\mathbb{R}_0^3)$, so kann man

$$\mathcal{D}(H_D^\circ) = [\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}_0^3)]^4, \quad H_D^\circ u = H_D u \quad \text{für } u \in \mathcal{D}(H_D^\circ) \quad (1.7)$$

als den "minimalen" dicht definierten, symmetrischen Diracoperator H_D° bezeichnen. Der zu H_D° adjungierte Operator $(H_D^\circ)^*$ wird dann der "maximale" Diracoperator H_D^m genannt. Unter sehr

allgemeinen Voraussetzungen an V kann $H_D^m = (H_D^0)^*$ folgendermaßen charakterisiert werden [25]:

$$\begin{aligned} D(H_D^m) &= \{u \mid u \in \mathcal{H}_D, u \in [W'_{1,\alpha}(\mathbb{R}_0^3)]^4, H_D u \in \mathcal{H}_D\}, \\ H_D^m u &= H_D u \quad \text{für } u \in D(H_D^m). \end{aligned} \quad (1.8)$$

$W_{2,\text{loc}}^1(\mathbb{R}_0^3)$ ist der lokale Sobolevraum der Funktionen $u \in L_{2,\text{loc}}(\mathbb{R}_0^3)$, deren lokale Ableitungen erster Ordnung im Distributionssinne zu $L_{2,\text{loc}}(\mathbb{R}_0^3)$ gehören. Da H_D^0 symmetrisch ist (d.h. $H_D^0 \subset H_D^m$), ist jede existierende selbstadjungierte Realisierung von H_D eine Erweiterung von H_D^0 bzw. eine Einschränkung von H_D^m ; man kann im allgemeinen nicht erwarten, daß H_D^0 schon wesentlich selbstadjungiert ist, daß also H_D^m schon selbstadjungiert ist. Da wir uns hauptsächlich für wasserstoffähnliche Atome interessieren, geben wir hier nur Spezialfälle der sehr allgemeinen Sätze von Schmincke^[26-28] für das Coulombpotential

$$V(\underline{x}) = - \frac{Z\alpha}{|\underline{x}|}, \quad (1.9)$$

wobei $\alpha^{-1} = 137.03602$ und Z die Kernladungszahl ist, wieder:

- (1) Für $Z \leq 118$ ist H_D^0 wesentlich selbstadjungiert.
- (2) Für $118 < Z \leq 137$ ist H_D^0 nicht wesentlich selbstadjungiert.

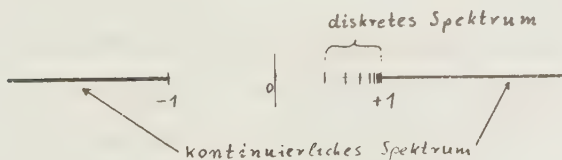
Es existiert jedoch eine physikalisch bestimmte wesentlich selbstadjungierte Erweiterung $H_D^e \supset H_D^0$ ($\Leftrightarrow (H_D^e)^* \subset (H_D^0)^*$) von H_D^0 , die durch die Endlichkeit der potentiellen Energie charakterisiert ist, d.h. für alle $u \in D(H_D^e)$ ist $\langle V \rangle < \infty$. Man erhält sie durch Einschränkung von H_D^m mittels dieser Randbedingung:

$$\mathcal{D}(H_D^e) = \left\{ u \mid u \in \mathcal{D}(H_D^m), \int d^3x \frac{|u(x)|^2}{|x|} < \infty \right\},$$

$$H_D^e u = H_D^m u. \quad (1.10)$$

Es ist zu bemerken, daß es neben dieser physikalischen Erweiterung noch unendlich viele andere wesentlich selbstadjungierte Erweiterungen gibt, etwa die, die durch Einschränkungen von H_D^m durch die Randbedingungen $\int d^3x \frac{|u(x)|^2}{|x|^{2\sigma}} < \infty$ mit $\sigma \in (\frac{1}{2}, 1)$ entstehen.

- (3) Für $Z \leq 137$ gibt es auch kein physikalisches Kriterium mehr, um eine der, für die Selbstadjungiertheit notwendigen, unendlich vielen möglichen Randbedingungen auszuwählen.
- (4) Jede selbstadjungierte Erweiterung von H_D^0 besitzt unabhängig von Z die Lücke $(-1, +1)$ im wesentlichen Spektrum [30]. Das bedeutet hier, daß das kontinuierliche Spektrum wie das wesentliche Spektrum immer gleich $\mathbb{R} \setminus (-1, +1)$ ist. Für $Z \leq 137$ haben die selbstadjungierten Erweiterungen eine Lücke im gesamten Spektrum, in der sich auch keine Eigenwerte endlicher Vielfachheit befinden und die für $Z \leq 118$ gleich dem Intervall $(-1, +\sqrt{1-(Z\alpha)^2})$ ist.



Figur 1: Spektrum von H_D^m für $Z \leq 118$

Wir sehen, daß der Fall $Z \leq 118$ am einfachsten zu handhaben ist und wollen uns deshalb auf diesen Fall beschränken.

Die Eigenfunktionen von H_D^m werden mit $u_a(\underline{x})$, die zugehörigen Energieeigenwerte mit E_a^0 bezeichnet. Die Abzählung $a \in Q_A$, z.B. $a \in \{1, 2, 3, \dots\}$, sei so, daß für $a < b$ $E_a^0 \leq E_b^0$ gilt. Der Hilbertraum $\mathcal{H}_D^p \subset \mathcal{H}_D$, der von allen Eigenwerten aufgespannt wird und dessen Orthogonalraum $\mathcal{H}_D^c = (\mathcal{H}_D^p)^\perp$ sind bekanntlich reduzierende Teilräume für den Operator H_D^m ([21] S.515). Man kann sagen, daß der Operator $H_D^p := H_D^m|_{\mathcal{H}_D^p}$ das Punktspektrum von H_D^m und der Operator $H_D^c := H_D^m|_{\mathcal{H}_D^c}$ das kontinuierliche Spektrum von H_D^m "erzeugt". Aus dem Spektrum ist ersichtlich, daß es für $\mathcal{H}_D^c$ die weitere Zerlegung $\mathcal{H}_D^c = \mathcal{H}_D^{c+} \oplus \mathcal{H}_D^{c-}$ gibt, so daß $H_D^{c+} := H_D^m|_{\mathcal{H}_D^{c+}}$ den positiven Teil und $H_D^{c-} := H_D^m|_{\mathcal{H}_D^{c-}}$ den negativen Teil des kontinuierlichen Spektrums erzeugt.

b) Fermionenfockraum für gebundene Elektronen

Da wir uns nur für Übergänge zwischen gebundenen Atomzuständen interessieren, wollen wir als Einteilchen-Fermionenraum den Hilbertraum $\mathcal{H}_D^p$ verwenden. Eine Mitberücksichtigung des "positiven Teils" $\mathcal{H}_D^{c+}$ bereitet im Prinzip keine allzugroßen zusätzlichen Schwierigkeiten (in [12] wurde das Spektrum durch ein zusätzliches Potential diskretisiert und dann der positive Teil genommen). Zum Aufbau unserer Feldtheorie verwenden wir die allgemeinen Konstruktionsprinzipien für Vielteilchenräume, Fockräume und Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren [31-33].

Wir betrachten zunächst ^{für $i \in \mathbb{N}$} das 1-fache vollständige Tensorprodukt $\mathcal{H}_1' = \hat{\otimes}_i \mathcal{H}_D^p$ des Hilbertraumes $\mathcal{H}_D^p$ mit sich selbst. Sei π eine Permutation aus der symmetrischen Gruppe $\mathcal{S}_1$ von 1 Objekten, $\sigma(\pi)$ das Vorzeichen von π , und sei der unitäre Per-

mutationsoperator U_π auf $\mathcal{X}'_\ell$ die lineare Erweiterung von

$$U_\pi(f_1 \otimes \dots \otimes f_\ell) = f_{\pi(1)} \otimes \dots \otimes f_{\pi(\ell)}, \quad f_1, \dots, f_\ell \in \mathcal{X}'_\ell, \quad (1.11)$$

so definiert

$$A_\ell = \frac{1}{\ell!} \sum_{\pi \in \mathcal{P}_\ell} \sigma(\pi) U_\pi \quad (1.12)$$

den Antisymmetrisierungsoperator auf $\mathcal{X}'_\ell$. Führt man, entsprechend zu U_π , die speziellen Permutationsoperatoren

$$V_{\ell,i}(f_1 \otimes \dots \otimes f_{i-1} \otimes f_i \otimes \dots \otimes f_\ell) := f_i \otimes f_1 \otimes \dots \otimes f_{i-1} \otimes f_{i+1} \otimes \dots \otimes f_\ell, \quad (1.13)$$

$$V'_{\ell,i}(f_1 \otimes \dots \otimes f_i \otimes f_{i+1} \otimes \dots \otimes f_\ell) := f_2 \otimes \dots \otimes f_i \otimes f_1 \otimes f_{i+1} \otimes \dots \otimes f_\ell, \quad (1.14)$$

$f_1, \dots, f_\ell \in \mathcal{X}'_\ell,$

so erhält man die nützlichen Zerlegungen

$$A_\ell = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (-1)^{i-1} (1 \otimes A_{\ell-1}) V_{\ell,i}, \quad (1.15)$$

$$A_\ell = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (-1)^{i-1} V'_{\ell,i} (1 \otimes A_{\ell-1}). \quad (1.16)$$

A_1 ist der Projektor (d.h. $(A_1)^2 = A_1$) auf den Unterraum $\mathcal{X}'_{\ell,1} := A_1 \mathcal{X}'_\ell$ der $\mathbb{C}^{41}$ -wertigen Funktionen $u_1(x_1, \dots, x_1)$ aus $\mathcal{X}'_1$, die antisymmetrisch in den Argumenten $x_1, \dots, x_1$ sind. Für $v_1 \in \mathcal{X}'_{\ell,1}$, $u_1 \in \mathcal{X}'_{\ell,1}$ ist

$$\langle v_\ell | u_\ell \rangle_\ell = \int d^3 x_1 \dots \int d^3 x_\ell v_\ell^+(x_1, \dots, x_\ell) \cdot u_\ell(x_1, \dots, x_\ell), \quad (1.17)$$

$$v_\ell^+(x_1, \dots, x_\ell) \cdot u_\ell(x_1, \dots, x_\ell) := \sum_{i_1=1}^4 \sum_{i_\ell=1}^4 v_{i_1, \dots, i_\ell}^*(x_1, \dots, x_\ell) u_{i_1, \dots, i_\ell}(x_1, \dots, x_\ell),$$

das Skalarprodukt auf $\mathcal{H}'_{\ell,A}$ und für orthonormierte Eigenfunktionen $u_{a_i} \in \mathcal{H}^p_D$, $a_i \in Q_A$, $i=1, \dots, \ell$, bildet die Menge der Vektoren der Form

$$u_{a_1 \dots a_\ell} = \sqrt{\ell!} A_\ell (u_{a_1} \otimes \dots \otimes u_{a_\ell}) \quad (1.18)$$

für $a_1 < a_2 < \dots < a_\ell$ eine orthonormierte Basis in $\mathcal{H}'_{\ell,A}$, $\ell > 0$.

Da Elektronen dem Pauliprinzip unterworfen sind, müssen wir gerade $\mathcal{H}'_{\ell,A}$ als 1-Elektronenraum wählen - $\mathcal{H}'_\ell$ wäre der Zustandsraum für 1 unterscheidbare Elektronen. Unser Fockraum $\mathcal{F}'_A$ für gebundene Elektronen ist dann die orthogonale Summe über alle diese 1-Elektronenräume,

$$\mathcal{F}'_A = \bigoplus_{\ell=0}^{\infty} \mathcal{H}'_{\ell,A}, \quad \mathcal{H}'_{0,A} := \mathbb{C}, \quad (1.19)$$

versehen mit dem Skalarprodukt

$$\langle v | u \rangle_{\mathcal{F}'_A} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \langle v_\ell | u_\ell \rangle_\ell, \quad v = v_1 \oplus v_2 \oplus \dots \in \mathcal{F}'_A, \quad u = u_1 \oplus u_2 \oplus \dots \in \mathcal{F}'_A, \quad (1.20)$$

und der Norm $\|u\|_{\mathcal{F}'_A} = (\langle u | u \rangle_{\mathcal{F}'_A})^{1/2}$.

Durch Einbettung der Basis (1.18) gewinnt man für $\mathcal{F}'_A$ die orthonormierte Basis

$$u_{\mathcal{F}'_A, \ell, a_1 \dots a_\ell} = 0 \oplus \dots \oplus 0 \oplus u_{a_1 \dots a_\ell} \oplus 0 \oplus \dots, \quad \ell = 1, 2, \dots, \quad a_i \in Q_A \quad i=1, \dots, \ell, \quad a_1 < \dots < a_\ell \quad (1.21)$$

$$u_{\mathcal{F}'_A, 0} := 1 \oplus 0 \oplus 0 \oplus \dots$$

Wir definieren für jedes $f \in \mathcal{H}'_{1,A} = \mathcal{H}'_1$

$$(\psi^*(f) u)_\ell = \sqrt{\ell!} A_\ell (f \otimes u_{\ell-1}) \quad (1.22)$$

$$(\psi(f) u)_\ell = \sqrt{\ell+1} \int d^3x f^*(x) u_{\ell+1}(x, *, \dots, *) \quad (1.23)$$

als Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperator für ein Elektron im Zustand f . Zur Bestimmung der Definitionsbereiche leiten wir mit Hilfe von $A_1 = A_1^* = A_1^2$ und (1.15) oder (1.16) die Beziehungen

$$\|\psi^*(f) u_{\mathcal{F}'_A, \ell, a_1 \dots a_\ell}\|_{\mathcal{F}'_A}^2 = \|f\|_1^2 - \sum_{i=1}^{\ell} |\langle u_{a_i} | f \rangle_1|^2 \leq \|f\|_1^2 \quad (1.24)$$

$$\|\psi(f) u_{\mathcal{F}'_A, \ell, a_1 \dots a_\ell}\|_{\mathcal{F}'_A}^2 = \sum_{i=1}^{\ell} |\langle u_{a_i} | f \rangle_1|^2 \leq \|f\|_1^2 \quad (1.25)$$

ab. Wir sehen, daß die Feldoperatoren (1.22), (1.23) auf der Basis (1.21) gleichmäßig beschränkt sind, und daß die obere Schranke $\|f\|_1$ offensichtlich auch angenommen werden kann. Sie sind folglich beschränkte, auf ganz $\mathcal{F}'_A$ definierte Operatoren, die beide die Operatornorm $\|f\|_1$ haben, und die den Vertauschungsrelationen

$$\{\psi(f), \psi^*(g)\} = \langle f | g \rangle_1, \quad \{\psi(f), \psi(g)\} = 0, \quad \{\psi^*(f), \psi^*(g)\} = 0 \quad (1.26)$$

genügen. Übrigens ergibt sich auch aus der Antivertauschung die Beschränktheit, denn aus der 1. Relation (1.26) folgt

$$\|\psi(f) u_{\mathcal{F}'_A}\|_{\mathcal{F}'_A}^2 + \|\psi^*(f) u_{\mathcal{F}'_A}\|_{\mathcal{F}'_A}^2 = \|f\|_1^2 \|u_{\mathcal{F}'_A}\|_{\mathcal{F}'_A}^2. \quad (1.27)$$

Wir erwähnen noch, daß sich unsere Fockraumbasis (1.21) aus dem Vakuum $u_{\mathcal{F}'_A, 0}$ durch Anwendung der Erzeugungsoperatoren aufbauen läßt:

$$u_{\mathcal{F}'_A, \ell, a_1 \dots a_\ell} = \psi^*(u_{a_1}) \dots \psi^*(u_{a_\ell}) u_{\mathcal{F}'_A, 0}. \quad (1.28)$$

Die wohldefinierten Feldoperatoren (1.22), (1.23) "erhält" man aus den in der Physik üblichen

$$(\psi_p^*(\underline{x}) u)_\ell(\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_\ell) = \frac{1}{\ell!} \sum_{i=1}^{\ell} (-1)^{i-1} \delta(\underline{x} - \underline{x}_i) u_{\ell-1}(\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_{i-1}, \underline{x}_{i+1}, \dots, \underline{x}_\ell), \quad (1.29)$$

$$(\psi_p(\underline{x}) u)_\ell(\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_\ell) = \sqrt{\ell+1} u_{\ell+1}(\underline{x}, \underline{x}_1, \dots, \underline{x}_\ell), \quad (1.30)$$

die die Vertauschungsrelationen

$$\{\psi(\underline{x}), \psi^*(\underline{x}')\} = \delta(\underline{x} - \underline{x}'), \quad \{\psi(\underline{x}), \psi(\underline{x}')\} = 0, \quad \{\psi^*(\underline{x}), \psi^*(\underline{x}')\} = 0 \quad (1.31)$$

besitzen, durch "Ausschmieren" mit der Funktion $f \in \mathcal{X}'_A$:

$$\begin{aligned} \psi^*(f) &= \int d^3x f(\underline{x}) \psi_p^*(\underline{x}) \\ \psi(f) &= \int d^3x f^*(\underline{x}) \psi_p(\underline{x}) \end{aligned} \quad (1.32)$$

Wir gehen jetzt von $\mathcal{F}'_A$ zu einem äquivalenten Fockraum $\mathcal{F}_A$ über, den wir dann auch im weiteren beibehalten werden. Dazu stellen wir fest, daß jede l-Teilchen Funktion $u_1 \in \mathcal{H}'_{\ell, A}$ die Reihenentwicklung

$$u_\ell = \sum_{\substack{a_1, \dots, a_\ell \in \mathcal{Q}_A \\ a_1 < \dots < a_\ell}} \alpha_\ell^{a_1 \dots a_\ell} u_{a_1 \dots a_\ell} = \frac{1}{\ell!} \sum_{a_1, \dots, a_\ell \in \mathcal{Q}_A} \alpha_\ell^{a_1 \dots a_\ell} u_{a_1 \dots a_\ell} \quad (1.33)$$

nach der Basis (1.18) hat, wobei die komplexen Entwicklungskoeffizienten

$$\alpha_\ell^{a_1 \dots a_\ell} = \langle u_{a_1 \dots a_\ell} | u_\ell \rangle_\ell, \quad a_1 < \dots < a_\ell \quad (1.34)$$

in der zweiten Summe antisymmetrisch ergänzt worden sind,

$$\alpha_\ell^{a_{\pi(1)} \dots a_{\pi(\ell)}} = o(\pi) \alpha_\ell^{a_1 \dots a_\ell}, \quad a_1 < \dots < a_\ell, \quad \pi \in \mathcal{S}_\ell. \quad (1.35)$$

Die Folge dieser Koeffizienten ist nach (1.33), (1.34) eindeutig dem Element $u_\ell \in \mathcal{H}_{\ell,A}'$ zugeordnet:

$$u_\ell \longleftrightarrow \alpha_\ell := (\alpha_\ell^{a_1 \dots a_\ell})_{a_1, \dots, a_\ell \in Q_A} \quad (1.36)$$

Die Menge dieser Folgen bildet mit dem Skalarprodukt

$$\langle \beta_\ell | \alpha_\ell \rangle_\ell = \sum_{\substack{a_1, \dots, a_\ell \in Q_A}} (\beta_\ell^{a_1 \dots a_\ell})^* \alpha_\ell^{a_1 \dots a_\ell} \quad (1.37)$$

den Hilbertraum $\mathcal{H}_{\ell,A}$ der ℓ -fachen antisymmetrischen Folgen. Da für die Skalarprodukte in $\mathcal{H}_{\ell,A}'$ bzw. $\mathcal{H}_{\ell,A}$ die Gleichung

$$\langle v_\ell | u_\ell \rangle_\ell = \sum_{\substack{a_1, \dots, a_\ell \in Q_A \\ u_\ell \in \mathcal{H}_{\ell,A}'}} (\beta_\ell^{a_1 \dots a_\ell})^* \alpha_\ell^{a_1 \dots a_\ell} = \frac{1}{\ell!} \langle \beta_\ell | \alpha_\ell \rangle_\ell, \quad v_\ell \leftrightarrow \beta_\ell, \quad (1.38)$$

gilt, ist nach Einführung des neuen Skalarproduktes $\langle \beta_\ell | \alpha_\ell \rangle'_\ell := \ell! \langle \beta_\ell | \alpha_\ell \rangle_\ell$ oder nach der Ersetzung $\alpha_\ell \rightarrow \frac{1}{\ell!} \alpha_\ell$, $\beta_\ell \rightarrow \frac{1}{\ell!} \beta_\ell$ isometrisch isomorph zu $\mathcal{H}_{\ell,A}'$. Diese Abbildung überträgt Operatoren von $\mathcal{H}_{\ell,A}'$ auf $\mathcal{H}_{\ell,A}$; wir werden daher der Einfachheit halber die den Operatoren (1.11)–(1.14) zugeordneten Operatoren mit denselben Buchstaben bezeichnen. Der Fockraum

$$\mathcal{F}_A = \bigoplus_{\ell=0}^{\infty} \mathcal{H}_{\ell,A}, \quad \mathcal{H}_{0,A} := \mathbb{C}, \quad (1.39)$$

versehen mit dem analog zu (1.20) definierten Skalarprodukt, ist dann ebenfalls isometrisch isomorph zu $\mathcal{F}_A'$.

Den Feldoperatoren (1.22), (1.23) auf $\mathcal{F}_A'$ sind für $f \leftrightarrow \gamma = (\gamma^a)_{a \in Q_A}$ durch $\|\gamma\|_1$ die beschränkten, auf ganz $\mathcal{F}_A$ definierten Feldoperatoren

$$(b^*(\gamma)\alpha)_\ell = \sqrt{\ell} A_\ell(\gamma, \alpha_{\ell-1}), \quad \gamma \in \mathcal{H}_1, \alpha \in \mathcal{F}_A, \quad (1.40)$$

$$(b(\gamma)\alpha)_\ell = \sqrt{\ell+1} \sum_{a \in Q_A} (\gamma^a)^* \alpha_{\ell+1}^a, \quad \gamma \in \mathcal{H}_1, \alpha \in \mathcal{F}_A, \quad (1.41)$$

die den Vertauschungsrelationen

$$\{b(y), b^*(y')\} = \langle y | y' \rangle, \quad \{b(y), b(y')\} = 0, \quad \{b^*(y), b^*(y')\} = 0 \quad (1.42)$$

genügen, zugeordnet. Von besonderer Bedeutung für die WWN erweist sich die Darstellung dieser Operatoren durch die Summen

$$b^*(y) = \sum_{\ell=0}^{\infty} b_{\ell}^*(y) \quad , \quad b(y) = \sum_{\ell=0}^{\infty} b_{\ell}(y) \quad (1.43)$$

über die Teiloperatoren

$$b_{\ell}^*(y)\alpha := 0 \oplus \dots \oplus 0 \oplus \underbrace{(\sqrt{\ell+1} A_{\ell+1}(y \cdot \alpha_{\ell}))}_{(\ell+1)\text{-te Stelle}} \oplus 0 \oplus \dots \quad , \quad y \in \mathcal{H}_1, \alpha \in \mathcal{F}_A, \quad (1.44)$$

$$b_{\ell}(y)\alpha := 0 \oplus \dots \oplus 0 \oplus \underbrace{(\sqrt{\ell+1} \sum_{a \in Q_A} (y^a)^* \alpha_{\ell+1}^a)}_{\ell\text{-te Stelle}} \oplus 0 \oplus \dots \quad , \quad y \in \mathcal{H}_1, \alpha \in \mathcal{F}_A. \quad (1.45)$$

$b_{\ell}^*(y)$ ist der Operator, der nur bei ℓ vorhandenen Elektronen ein zusätzliches Elektron (im Zustand y) erzeugt; $b_{\ell}(y)$ ist der zu $b_{\ell}^*(y)$ adjungierte Operator, der nur von $\ell+1$ vorhandenen Elektronen ein Elektron (im Zustand y) vernichtet.

Von Interesse sind noch die speziellen Feldoperatoren

$$b_a^* := b^*(\delta_a) \quad , \quad b_a := b(\delta_a) \quad (1.46)$$

wobei $\delta_a = (\delta_a^i)_{i \in Q_A}$ ein, dem Basisvektor $u_a \in \mathcal{H}_1^i$ zugeordneter Basisvektor aus $\mathcal{H}_1$ und δ_a^i das Kroneckersymbol ist. Wegen

$$(b_a^* \alpha)_{\ell}^{a_1 \dots a_{\ell}} = \frac{1}{\ell!} \sum_{i=1}^{\ell} (-1)^{i-1} \delta_a^{a_i} \alpha_{\ell-1}^{a_1 \dots a_{i-1} a_{i+1} \dots a_{\ell}} \quad , \quad (1.47)$$

$$(b_a \alpha)_{\ell}^{a_1 \dots a_{\ell}} = \sqrt{\ell+1} \alpha_{\ell+1}^{a_1 a_2 \dots a_{\ell}} \quad (1.48)$$

sind sie den Operatoren (1.29), (1.30) zuzuordnen. Sie sind die

genauen Definitionen von den in der Physik üblichen Operatoren gleicher Bezeichnung, die nach den formalen Entwicklungen

$$\psi_p^*(\underline{x}) = \sum u_a^*(\underline{x}) b_a^* \quad , \quad \psi_p(\underline{x}) = \sum u_a(\underline{x}) b_a \quad (1.49)$$

als Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperator für ein Elektron im Zustand $u_a(\underline{x})$ gedeutet werden. Bekanntlich wird mit ihnen der freie Elektronen-Hamiltonoperator

$$H^{oe} = \sum_{a \in Q_A} E_a^o b_a^* b_a \quad , \quad D(H^{oe}) = \{ \alpha \in \mathcal{F}_A, \|H^{oe} \alpha\|_{\mathcal{F}_A} < \infty \} \quad (1.50)$$

der sich auch in der Komponentenform

$$(H^{oe} \alpha)_i^{a_1 \dots a_\ell} = \sum_{i=1}^{\ell} E_{a_i}^o \alpha_i^{a_1 \dots a_\ell} \quad , \quad a_1, \dots, a_\ell \in Q_A, \ell \in \mathbb{N}, (H^{oe} \alpha)_0 = 0 \quad (1.51)$$

(wegen $E_a^o > 0$ nach unten beschränkt) schreiben läßt, gebildet. Er ist selbstadjungiert und für $\sum_{a \in Q_A} |E_a^o| < \infty$ sogar beschränkt. Wir sehen, daß H^{oe} als die zweitquantisierte Form des, dem reduzierten Diracoperator H_D^p zugeordneten, diagonalen Einteilchenoperators H_1^{oe} ,

$$H_D^p \leftrightarrow H_1^{oe} \quad , \quad (H_1^{oe} \alpha)_1^a = E_a^o \alpha_1^a \quad , \quad (1.52)$$

offensichtlich diagonal in $\mathcal{F}_A$ ist. Diese Eigenschaft begründet nachträglich die Wahl von $\mathcal{F}_A$: Wir verlangen von unserem Fermionenfockraum, daß der freie Hamiltonoperator in ihm diagonal sein soll.

c) Fockraum der transversalen Photonen

Da der skalare Anteil des Vektorpotentials schon als c-Zahl in (1.4) eingeführt worden ist, und der longitudinale Anteil durch Coulombbeziehung festgelegt ist, quantisieren wir wie üblich nur seine transversalen Teile. Die Zustände eines beliebigen Photons mit der Polarisation $\lambda \in \{1, 2\}$ und dem Impuls $\underline{k} \in \mathbb{R}^3$

werden durch Wellenfunktionen $f_i(k, \lambda) = f_i(k_\lambda)$, $k_\lambda = (k, \lambda)$, beschrieben. Diese sind Elemente des Hilbertraumes $\mathcal{H}_1 = L_2(\mathbb{K})$, $\mathbb{K} = \mathbb{R}^3 \times \{1, 2\}$, der für $\lambda = 1, 2$ quadratintegrierbaren Funktionen. Sei $d^3 k_\lambda$ das Maß auf $\mathbb{K}$, so bedeutet $\int d^3 k_\lambda \dots$ Integration über $\mathbb{R}^3$ und Summation über $\lambda = 1, 2$. Mit $\mathcal{H}_n = L_2(\mathbb{K}^n)$ bezeichnen wir den Hilbertraum der quadratintegrierbaren Funktionen von den n Variablen $k_1, \dots, k_n$, $k_i \in \mathbb{K}$, der mit dem vollständigen Tensorprodukt $\hat{\otimes} \mathcal{H}_1$ zu identifizieren ist. Auf $\mathcal{H}_n$ seien die Operatoren $U_i, V_{n,i}, V'_{n,i}$ analog zu (1.11), (1.13), (1.14) definiert. Der Symmetrisierungsoperator

$$S_n = \frac{1}{n!} \sum_{\pi \in \Gamma_n} U_\pi \quad (1.53)$$

auf $\mathcal{H}_n$ hat dann die (1.15), (1.16) entsprechenden Darstellungen

$$S_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (1 \otimes S_{n-1}) V_{n,i} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n V'_{n,i} (1 \otimes S_{n-1}), \quad (1.54)$$

wobei der Operator $1 \otimes S_{n-1}$ nur symmetrisierend auf die letzten $n-1$ Variablen wirkt.

Bei der Bildung von Vielphotonenräumen ist nun zu berücksichtigen, daß Photonen Bosecharakter haben, daß also Vielphotonenzustände symmetrisch in den Nummern, die die Photonen abzählen, sein müssen. Wir wählen als n -Photonenraum, $n \in \mathbb{N}$, den Unterraum $\mathcal{H}_{n,S} = S_n \mathcal{H}_n$ von $\mathcal{H}_n$, der von allen symmetrischen Funktionen aus $\mathcal{H}_n$ gebildet wird, und der mit dem Skalarprodukt

$$\langle g_n | f_n \rangle_n = \int d^3 k_1 \dots \int d^3 k_n g_n^*(k_1, \dots, k_n) f_n(k_1, \dots, k_n), \quad g_n, f_n \in \mathcal{H}_{n,S}, \quad (1.55)$$

und der Norm $\|f_n\|_n = (\langle f_n | f_n \rangle_n)^{1/2}$ versehen ist.

Der Fockraum der transversalen Photonen, $\mathcal{F}_R$, ist dann die

orthogonale Summe über alle Räume fester Photonenzahl,

$$\mathcal{F}_R = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{H}_{n,s} \quad , \quad \mathcal{H}_{0,s} := \mathbb{C} \quad , \quad (1.56)$$

ausgestattet mit dem Skalarprodukt

$$\langle g | f \rangle_{\mathcal{F}_R} = \sum_{n=0}^{\infty} \langle g_n | f_n \rangle_n \quad (1.57)$$

und der Norm $\|f\|_{\mathcal{F}_R} = (\langle f | f \rangle_{\mathcal{F}_R})^{1/2}$.

Wir definieren analog zu (1.22), (1.23)

$$(a^*(f_1)g)_n = \sqrt{n} \sum_m (f \otimes g_{n-1})_m \quad , \quad \mathcal{D}(a^*(f_1)) = \{g \in \mathcal{F}_R ; \|a^*(f_1)g\|_{\mathcal{F}_R} < \infty\} \quad , \quad (1.58)$$

$$(a(f_1)g)_n = \sqrt{n+1} \int d^3k f_1^*(k) g_{n+1}(k, \dots, c) \quad , \quad \mathcal{D}(a(f_1)) = \{g \in \mathcal{F}_R ; \|a(f_1)g\|_{\mathcal{F}_R} < \infty\} \quad , \quad (1.59)$$

für alle $f_1 \in \mathcal{H}_1$ als Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperator für ein Elektron im Zustand f_1 . Um zu Aussagen über die "Größen" der Definitionsbereiche zu kommen, betrachten wir den Photonen-zahloperator

$$(Ng)_n = n g_n \quad , \quad \mathcal{D}(N) = \left\{ g \in \mathcal{F}_R ; \sum_{n=0}^{\infty} \|n g_n\|_n^2 < \infty \right\} \quad . \quad (1.60)$$

Sein Definitionsbereich ist offensichtlich dicht in $\mathcal{F}_R$, denn die in $\mathcal{F}_R$ dichte Menge der finiten Vektoren $g \in \mathcal{F}_R$, $g = g_0 \otimes \dots \otimes g_n \otimes 0 \otimes \dots$, $n < \infty$, ist in $\mathcal{D}(N)$ enthalten. Da $n \in \mathbb{N}_0$, $\mathbb{N}_0 = \{0\} \cup \mathbb{N}$, reelle positive Zahlen sind, ist somit N ein selbstadjungierter, positiver Operator, dessen Spektrum $\sigma(N) = \mathbb{N}_0$ aus den Eigenwerten n besteht, und dessen Eigenprojektionen genau die Projektoren auf die Unterräume fester Photonenzahl sind. Dementsprechend sind auch

$$(\sqrt{N+1}g)_n = \sqrt{n+1} g_n \quad , \quad \mathcal{D}(\sqrt{N+1}) = \left\{ g \in \mathcal{F}_R ; \sum_{n=0}^{\infty} \|\sqrt{n+1} g_n\|_n^2 < \infty \right\} \quad , \quad (1.61)$$

$$(\sqrt{N}g)_n = \sqrt{n} g_n \quad , \quad \mathcal{D}(\sqrt{N}) = \left\{ g \in \mathcal{F}_R ; \sum_{n=0}^{\infty} \|\sqrt{n} g_n\|_n^2 < \infty \right\} \quad (1.62)$$

dicht definierte, selbstadjungierte, positive Operatoren in $\mathcal{F}_R$ und es gelten die Inklusionen

$$D(N) \subset D(\sqrt{N+1}) \subset D(\sqrt{N}) \subset \tilde{\mathcal{F}}_R \quad (1.63)$$

Die aus den Ungleichungen

$$\|a^*(f_1)g\|_{\tilde{\mathcal{F}}_R} \leq \|f_1\|_1 \|\sqrt{N}g\|_{\tilde{\mathcal{F}}_R} \leq \|f_1\|_1 \|\sqrt{N+1}g\|_{\tilde{\mathcal{F}}_R} \quad (1.64)$$

$$\|a(f_1)g\|_{\tilde{\mathcal{F}}_R} \leq \|f_1\|_1 \|\sqrt{N+1}g\|_{\tilde{\mathcal{F}}_R} \quad (1.65)$$

folgenden Inklusionen

$$D(\sqrt{N+1}) \subset D(a^*(f_1)) \quad , \quad D(\sqrt{N+1}) \subset D(a(f_1)) \quad (1.66)$$

zeigen schließlich, daß die Feldoperatoren dicht definiert sind. Die Definitionsbereiche $D(\sqrt{N})$, $D(a^*(f_1))$, $D(a(f_1))$ sind jedoch echte Teilmengen von $\tilde{\mathcal{F}}_R$, denn der Vektor

$$\bar{g} = 0 \oplus \bar{g}_1 \oplus \bar{g}_2 \oplus \dots \quad , \quad \bar{g}_n := \frac{1}{n} e_1 \otimes \dots \otimes e_n \quad , \quad \|e_1\|_1 = 1 \quad , \quad \langle e_1 | f_1 \rangle \neq 0 \quad (1.67)$$

der wegen $\|\bar{g}\|_{\tilde{\mathcal{F}}_R}^2 = \sum_{n=1}^{\infty} \|\bar{g}_n\|_n^2 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} < \infty$ ein Element des Fockraumes $\tilde{\mathcal{F}}_R$ ist, kann wegen

$$\|\sqrt{N}\bar{g}\|_{\tilde{\mathcal{F}}_R}^2 = \sum_{n=1}^{\infty} \|\sqrt{n}\bar{g}_n\|_n^2 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} = \infty \quad , \quad (1.68)$$

$$\|a^*(f_1)\bar{g}\|_{\tilde{\mathcal{F}}_R}^2 = \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{1}{n^2} \|f_1\|_1^2 + \frac{1}{n} |\langle e_1 | f_1 \rangle|^2 \right] = \infty \quad , \quad (1.69)$$

$$\|a(f_1)\bar{g}\|_{\tilde{\mathcal{F}}_R}^2 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} |\langle e_1 | f_1 \rangle|^2 = \infty \quad (1.70)$$

nicht in ihnen enthalten sein. Die Bosefeldoperatoren sind daher im Gegensatz zu den Fermifeldoperatoren nicht beschränkt. Man kann weiterhin nachweisen, daß $D(a^*(f_1)) = D(a(f_1))$ ist, und daß für die Kommutatoren der Feldoperatoren jeweils der Abschluß zu

nehmen ist [31,32]:

$$\overline{[a(f_1), a^*(f'_1)]} = \langle f_1 | f'_1 \rangle_1, \quad \overline{[a(f_1), a(f'_1)]} = 0, \quad \overline{[a^*(f_1), a^*(f'_1)]} = 0. \quad (1.71)$$

Bemerkenswert ist, daß sich die unbeschränkten Feldoperatoren als Summen über die zu (1.44), (1.45) analogen, beschränkten, auf ganz $\mathcal{F}_R$ definierten Operatoren

$$a_n^*(f_1)g = 0 \oplus \dots \oplus 0 \oplus \underbrace{(\sqrt{n+1} S_{n+1}(f_1 \otimes g_n))}_{(n+1)\text{-te Stelle}} \oplus 0 \oplus \dots, \quad (1.72)$$

$$a_n(f_1)g = 0 \oplus \dots \oplus 0 \oplus \underbrace{(\sqrt{n+1} \int d^3k f_1(k) g_{n+1}(k, \dots, c))}_{n\text{-te Stelle}} \oplus 0 \oplus \dots, \quad (1.73)$$

für die die Beziehungen

$$\langle g' | a_n^*(f_1)g \rangle_{\mathcal{F}_R} = \langle a_n(f_1)g' | g \rangle_{\mathcal{F}_R}, \quad (1.74)$$

$$\|a_n^*(f_1)g\|_{\mathcal{F}_R} \leq \sqrt{n+1} \|f_1\|_1 \|g_n\|_n \leq \sqrt{n+1} \|f_1\|_1 \|g\|_{\mathcal{F}_R}, \quad (1.75)$$

$$\|a_n(f_1)g\|_{\mathcal{F}_R} \leq \sqrt{n+1} \|f_1\|_1 \|g_{n+1}\|_{n+1} \leq \sqrt{n+1} \|f_1\|_1 \|g\|_{\mathcal{F}_R} \quad (1.76)$$

gelten, ausdrücken lassen:

$$a^*(f_1) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n^*(f_1), \quad a(f_1) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n(f_1), \quad (1.77)$$

wobei die Summen für alle $g \in D(a^*(f_1)) = D(a(f_1))$ konvergieren.

Wir wollen nun noch die Definition des freien Hamiltonoperators auf dem Fockraum $\widehat{\mathcal{F}}_R$ angeben. In der Physik verwendet man üblicherweise die "singulären" Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

$$(a^*(f_1)g)_n(k_1, \dots, k_n) = \frac{1}{i^n} \sum_{i=1}^n \delta(k_i - k_{i+1}) g_{n+1}(k_1, \dots, k_{i-1}, k_{i+1}, \dots, k_n), \quad (1.78)$$

$$(a(f_1)g)_n(k_1, \dots, k_n) = \sqrt{n+1} g_{n+1}(k_1, k_1, \dots, k_n), \quad (1.79)$$

die die Vertauschungsrelationen

$$[a(\underline{k}), a^*(\underline{k}')] = \delta(\underline{k} - \underline{k}') , \quad [a(\underline{k}), a(\underline{k}')] = 0 , \quad [a^*(\underline{k}), a^*(\underline{k}')] = 0 \quad (1.80)$$

haben, zur Bildung des Operators $\underline{A}(\underline{x})$ des Vektorpotentials,

$$\underline{A}(\underline{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k \frac{\underline{\xi}(\underline{k})}{\sqrt{2\omega(\underline{k})}} \left(e^{i\underline{k}\underline{x}} a(\underline{k}) + e^{-i\underline{k}\underline{x}} a^*(\underline{k}) \right) \quad (1.81)$$

und des Hamiltonoperators für freie Photonen

$$H^{op} = \int d^3k \omega(\underline{k}) a^*(\underline{k}) a(\underline{k}) . \quad (1.82)$$

Dabei sind $\underline{\xi}(\underline{k})$ zwei zueinander orthogonale Einheitsvektoren,

die der Transversalitätsbedingung $\underline{k} \cdot \underline{\xi}(\underline{k}) = 0$ genügen, und $\omega(\underline{k}) = \sqrt{\mu^2 + \underline{k}^2}$,
 $\underline{k} = |\underline{k}|$,
 für eine fiktive Photonenmasse $\mu \geq 0$. Bezeichne

$$(H_1^{op} g_1)(\underline{k}) = \omega(\underline{k}) g_1(\underline{k}) , \quad \mathcal{D}(H_1^{op}) = \{ g_1 \in \mathcal{X}_1 ; \| \omega g_1 \|_1 < \infty \} \quad (1.83)$$

den selbstadjungierten Hamiltonoperator für ein freies Photon,

so wird H^{op} als seine zweitquantisierte Form,

$$(H^{op} g)_n(\underline{k}_1, \dots, \underline{k}_n) = \sum_{i=1}^n \omega(\underline{k}_i) g_n(\underline{k}_1, \dots, \underline{k}_n) , \quad n \in \mathbb{N} , \quad (H^{op} g)_0 := 0 , \quad (1.84)$$

$$\mathcal{D}(H^{op}) = \{ g \in \mathcal{F}_R ; \| H^{op} g \|_{\mathcal{F}_R} < \infty \} ,$$

zu einem wohldefinierten selbstadjungierten Operator. Sei

$\{ f_n^i, f_n^j \in \mathcal{X}_1 \}$ eine Orthonormalbasis in $\mathcal{X}_1$, so läßt sich H^{op} auch in der (1.82) entsprechenden Form

$$H^{op} = \sum_{i,j} \langle f_n^i | H_1^{op} f_n^j \rangle_1 a^*(f_n^i) a(f_n^j) \quad (1.85)$$

schreiben. Wegen $\mu \leq \omega(\underline{k})$ ist er nach unten beschränkt und es gilt:

$$\mu \| N g \|_{\mathcal{F}_R} \leq \| H^{op} g \|_{\mathcal{F}_R} , \quad g \in \mathcal{D}(H^{op}) . \quad (1.86)$$

2. Die Weisskopf-Wignersche Näherungsmethode

Im folgenden werden wir kurz die Grundzüge der WWN für die Wechselwirkung eines Einelektronenatoms, definiert durch unseren Diracoperator H_D^p , mit dem Strahlungsfeld der transversalen Photonen skizzieren. Weitere Erläuterungen dazu findet man in [12, 13, 34]. Wir definieren das wechselwirkende System, beweisen einen für die WWN wichtigen Existenzsatz und erläutern dann die WWN.

a) Das Atom-Photon System

Ausgangspunkt für die Wechselwirkung eines gebundenen^{en} Elektrons mit dem Strahlungsfeld ist der formale Hamiltonoperator

$$H = H^o + H' \quad (2.1)$$

mit dem freien Hamiltonoperator

$$H^o = H^{oe} + H^{op}, \quad H^{oe} = \sum_{a \in Q_A} E_a^o b_a^* b_a, \quad H^{op} = \int d^3k \omega(k) a^*(k) a(k) \quad (2.2)$$

und dem üblichen Wechselwirkungsoperator der "Minimalkopplung"

$$H' = e \int d^3x \underline{A}(\underline{x}) \underline{\psi}_p^*(\underline{x}) \underline{\alpha} \underline{\psi}_p(\underline{x}). \quad (2.3)$$

Die Kopplungskonstante e ist die Elementarladung, $\underline{A}(\underline{x})$ ist der Potentialoperator (1.81), $\underline{\psi}_p^*(\underline{x}), \underline{\psi}_p(\underline{x})$ sind die Elektronenfeldoperatoren (1.29), (1.30), und $\underline{\alpha}$ ist der Vektor der Diracmatrizen (1.5). Setzt man für $\underline{\psi}_p^*(\underline{x}), \underline{\psi}_p(\underline{x})$ die Entwicklungen (1.41) in (2.3) ein, so erhält man für H' die Ausdrücke

$$H' = \sum_{a, a' \in Q_A} \int d^3k \left[M^*(a, a'; k) a(k) + M(a', a; k) a^*(k) \right] b_a^* b_{a'} \quad (2.4)$$

$$= \sum_{a, a' \in Q_A} \int d^3k \left[M^*(a, a'; k) a(k) b_a^* b_{a'} + M(a, a'; k) a^*(k) b_{a'}^* b_a \right]$$

mit den Funktionen

$$M^*(a, a'; \hbar) = \frac{e^{-\xi(\hbar)}}{(2\pi)^{3/2} (2\omega(\hbar))^{1/2}} \int d^3x e^{i\hbar x} u_a^+(x) \propto u_{a'}(x), \quad (2.5)$$

von denen wir annehmen, daß sie für alle $a, a' \in Q_A$ quadratintegrierbar (über $\mathbb{K}$) sind, was z.B. für das H-Atom der Fall ist [18].

Um die bis jetzt gemachten Aussagen zu präzisieren, muß man erst den Zustandsraum, in dem der Hamiltonoperator wirkt, definieren. Wir postulieren, daß der Zustandsraum $\tilde{\mathcal{F}}$ des wechselwirkenden Systems das vollständige Tensorprodukt der Fockräume $\mathcal{F}_A$ und $\mathcal{F}_R$ ist:

$$\tilde{\mathcal{F}} = \mathcal{F}_A \hat{\otimes} \mathcal{F}_R. \quad (2.6)$$

Der freie Hamiltonoperator H^0 auf $\tilde{\mathcal{F}}$ ist der dicht definierte Operator

$$H^0 = H^{0e} \otimes 1 + 1 \otimes H^{0p}, \quad \mathcal{D}(H^0) = \mathcal{D}(H^{0e}) \otimes \mathcal{D}(H^{0p}) \quad (2.7)$$

mit H^{0e} nach (1.50) oder (1.51) und H^{0p} nach (1.84) oder (1.85). Da H^{0e} und H^{0p} (wesentlich) selbstadjungiert und nach unten beschränkt sind, ist auch H^0 wesentlich selbstadjungiert und nach unten beschränkt (Siehe [35] Kap. VI §4). Der Wechselwirkungsoperator H' läßt sich, (2.4) entsprechend, als die zwar immer noch formale Summe

$$H' = \sum_{a, a' \in Q_A} H'_{aa'} \quad (2.8)$$

über die jetzt jedoch auf einer dichten Menge wohldefinierten Teiloperatoren

$$H'_{aa'} = b_a^* b_{a'} a(M(a, a')) + b_{a'}^* b_a a^*(M(a, a')), \quad (2.9)$$

$$\mathcal{D}(H'_{aa'}) = \mathcal{F}_A \otimes \mathcal{D}(a(M(a, a')))$$

schreiben. Wir werden nicht auf die Konvergenz und auf sonstige Eigenschaften der Summe (2.8) eingehen, sondern nur die endlichen Partialsummen

$$H_Q' = \sum_{a, a' \in Q} H_{aa'}' \quad , \quad (2.10)$$

wobei $Q \subset Q_A$ eine beliebige endliche Teilmenge von Q_A sein soll, untersuchen. Als Definitionsbereich verwenden wir der Einfachheit halber die dichte Menge

$$D(H_Q') = \mathcal{F}_A \otimes D(\sqrt{N+1}) \quad . \quad (2.11)$$

Da alle Teiloperatoren H_{aa}' , wegen (1.66) auf $D(H_Q')$ definiert sind, sind auch alle endlichen Summen (2.10) tatsächlich auf $D(H_Q')$ erklärt.

b) Ein Existenzsatz für die WNW:

(1) H_Q' ist symmetrisch;

(2) H_Q' ist H^0 -beschränkt mit einer H^0 -Schranke kleiner 1.

Beweis:

(1) Es genügt zu zeigen, daß jeder Summand reelle Erwartungswerte $\langle F | H_{aa}' F \rangle_{\mathcal{F}}$, $F \in D(H_Q')$, hat. Jedes $F \in D(H_Q')$ ist eine endliche Summe von einfachen Tensoren,

$$F = \sum_{i=1}^n \alpha_i \otimes g_i \quad , \quad \alpha_i \in \mathcal{F}_A, g_i \in D(\sqrt{N+1}) \quad , \quad (2.12)$$

so daß man folgendes erhält:

$$\begin{aligned} \langle F | H_{aa}' F \rangle_{\mathcal{F}} &= \sum_{i,j=1}^n \left[\langle \alpha_i | b_a^* b_{a'} \alpha_j \rangle_{\mathcal{F}_A} \langle g_i | a(M(a, a')) g_j \rangle_{\mathcal{F}_R} + \right. \\ &\quad \left. + \langle \alpha_i | b_{a'}^* b_a \alpha_j \rangle_{\mathcal{F}_A} \langle g_i | a^*(M(a, a')) g_j \rangle_{\mathcal{F}_R} \right] . \end{aligned} \quad (2.13)$$

Da wegen der Adjungiertheit der Operatoren b_a^*, b_a

$$\langle \alpha_i | \ell_{a'}^* \ell_a \alpha_j \rangle_{\mathcal{F}_A} = \langle \alpha_j | \ell_a^* \ell_{a'} \alpha_i \rangle_{\mathcal{F}_A}^* \quad (2.14)$$

gilt, und da wegen der Adjungiertheit der Operatoren $\alpha^*(M(a, a')), a(M(a, a'))$

$$\langle g_i | \alpha^*(M(a, a')) g_j \rangle_{\mathcal{F}_R} = \langle g_j | a(M(a, a')) g_i \rangle_{\mathcal{F}_R}^* \quad (2.15)$$

gilt, folgt, daß die zweite Summe der rechten Seite von (2.13)

komplex konjugiert zu der ersten Summe ist. Daher ist $\langle F | H_Q' F \rangle$ reell.

(2) Zunächst folgen

$$\| 1 \otimes a(f_1) F \|_{\mathcal{F}} \leq \| f_1 \|_1 \| 1 \otimes \sqrt{N+1} F \|_{\mathcal{F}} + \| 1 \otimes a^*(f_1) F \|_{\mathcal{F}} \leq \| f_1 \|_1 \| 1 \otimes \sqrt{N+1} F \|_{\mathcal{F}} \quad (2.16)$$

aus (1.64), (1.65), denn wir können die α_i in (2.12) als orthogonal zueinander annehmen:

$$\begin{aligned} \| 1 \otimes a(f_1) F \|_{\mathcal{F}}^2 &= \sum_{i,j=1}^n \langle \alpha_i | \alpha_j \rangle_{\mathcal{F}_A} \langle a(f_1) g_i | a(f_1) g_j \rangle_{\mathcal{F}_R} = \sum_{i=1}^n \| \alpha_i \|_{\mathcal{F}_A}^2 \| a(f_1) g_i \|_{\mathcal{F}_R}^2 \\ &\leq \| f_1 \|_1^2 \sum_{i=1}^n \| \alpha_i \|_{\mathcal{F}_A}^2 \| \sqrt{N+1} g_i \|_{\mathcal{F}_R}^2 = \| f_1 \|_1^2 \left\| \sum_{i=1}^n \alpha_i \otimes \sqrt{N+1} g_i \right\|_{\mathcal{F}}^2. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Zur Abschätzung von $\| H_Q' F \|_{\mathcal{F}}$, $F \in D(H_Q')$, benutzen wir die Dreiecksungleichung, die Beschränktheit der Operatoren b_a^*, b_a und (2.16):

$$\| H_Q' F \|_{\mathcal{F}} \leq \sum_{a,a' \in Q} \| H_{aa'}' F \|_{\mathcal{F}} \quad (2.18)$$

$$\leq K_Q \| 1 \otimes \sqrt{N+1} F \|_{\mathcal{F}} \quad , \quad K_Q := 2 \sum_{a,a' \in Q} \| M(a, a') \|_1$$

Wir verwenden nun die Abschätzung von Nelson [36], die besagt, daß es zu jedem $\varepsilon > 0$ eine Zahl $b > 0$ gibt, so daß

$$\| \sqrt{N+1} g \|_{\mathcal{F}_R} \leq \varepsilon \| N g \|_{\mathcal{F}_R} + b \| g \|_{\mathcal{F}_R} \quad (2.19)$$

für alle $g \in D(N)$ gilt und erhalten die Ungleichung

$$\|H_Q' F\|_{\mathcal{F}} \leq \varepsilon K_Q \|1 \otimes N F\|_{\mathcal{F}} + b K_Q \|F\|_{\mathcal{F}}. \quad (2.20)$$

Weiterhin folgt

$$\|(H^0 \otimes 1 + 1 \otimes H^0) F\|_{\mathcal{F}} \geq \mu \|1 \otimes N F\|_{\mathcal{F}} \quad (2.21)$$

aus der Positivität der beiden Teiloperatoren (2.7) und aus (1.86). Daraus ergibt sich nun die H^0 -Beschränktheit:

$$\|H_Q' F\|_{\mathcal{F}} \leq \varepsilon \mu K_Q \|H^0 F\|_{\mathcal{F}} + b K_Q \|F\|_{\mathcal{F}}. \quad (2.22)$$

Man kann, bei fester Masse μ , ε kleiner als $(\mu K_Q)^{-1}$ wählen, so daß die H^0 -Schranke kleiner als 1 ausfällt.

Mit (1), (2) und $D(H^0) \subset D(H_Q')$ folgt aus dem Rellich-Kato-Theorem [21], daß der Hamiltonoperator

$$H_Q = H^0 + H_Q' \quad (2.23)$$

wesentlich selbstadjungiert ist. Damit können in physikalischen Theorien, die durch Hamiltonoperatoren der Art (2.23) beschrieben werden, keine Unendlichkeiten auftreten, denn sie erzeugen unitäre Zeitentwicklungsoperatoren $U_Q(t) = \exp(-i\bar{H}_Q t)$; $\bar{H}_Q$ bedeutet den Abschluß von H_Q .

c) Die Weisskopf-Wignersche Näherungsmethode

Mit Hilfe der Teiloperatoren

$$H_{\varepsilon, n, n'}' := b_{\varepsilon}^*(\mathcal{E}_n) b_{\varepsilon}'(\mathcal{E}_{n'}) \otimes a_n(M(a, a')) + b_{\varepsilon}^*(\mathcal{E}_n) b_{\varepsilon}'(\mathcal{E}_n) a_n^*(M(a, a')) \quad (2.24)$$

die man mit den Operatoren (1.44), (1.45), (1.72), (1.73) bildet, kann man H_Q' noch feiner zerlegen:

$$H_Q' = \sum_{\varepsilon} \sum_{n \neq n'} \sum_{n, n', \varepsilon_Q} H_{\varepsilon, n, n'}' \quad (2.25)$$

Definition der WVN:

(1) Sei $LN \subset \mathbb{N}_0 \times \mathbb{N}_0$ und $I = LN \times Q$, so ist der Operator

$$H_I = H^0 + H_I^1, \quad H_I^1 = \sum_{\substack{(\ell, n, a) \in I \\ (\ell, n, a') \in I}} H_{\ell n a a'}^1 \quad (2.26)$$

offensichtlich auch selbstadjungiert, und die Theorie, die durch ihn beschrieben wird, wird als eine Weisskopf-Wigner Näherung bezeichnet. Innerhalb dieser Theorie, die ebenfalls durch eine unitäre Zeitentwicklung charakterisiert ist, kann es demnach auch keine Unendlichkeiten, wie z.B. divergente Linienverschiebungen, geben.

(2) Um die Näherung, die man in (1) gemacht hat, wieder aufzuheben, betrachten wir eine Folge von Operatoren,

$$H_I = H_{I_0}, \quad H_{I_1}, \quad H_{I_2}, \quad \dots \quad (2.27)$$

für die Indexmengen

$$I = I_0 \subset I_1 \subset I_2 \subset \dots \subset \mathbb{N}_0 \times \mathbb{N}_0 \times Q_A, \quad (2.28)$$

die gegen $\mathbb{N}_0 \times \mathbb{N}_0 \times Q_A$ konvergieren. Die so beschriebenen Theorien werden schrittweise "besser" und ein "Grenzwert" der Folge der Operatoren (2.27), der nach einem eventuellen Renormierungsverfahren in irgendeinem Sinne vorzunehmen ist, beschreibt dann die exakte Feldtheorie unseres wechselwirkenden Systems.

Man stellt fest, daß für eine WVN, beschrieben durch H_I , der Hilbertraum $\mathcal{F}$ zu "groß" ist: Es gibt Elemente aus $\mathcal{F}$, die an der Wechselwirkung nicht teilnehmen, die durch H_I^1 auf Null abgebildet werden. Das wird deutlich, wenn wir von $\mathcal{F}$ zu dem äquivalenten Hilbertraum

$$\bigoplus_{n=0}^{\infty} \bigoplus_{\ell=0}^{\infty} \bigoplus_{\substack{a_1, \dots, a_\ell \in Q_A \\ u_1 < \dots < u_\ell}} \mathcal{H}_{\ell, A; n, S}^{a_1 \dots a_\ell} \quad (2.29)$$

den wir auch wieder mit $\mathcal{F}$ bezeichnen, übergehen. $\mathcal{H}_{\ell, A; n, S}^{a_1 \dots a_\ell}$ ist für $a_1, \dots, a_\ell \in Q_A$, $a_1 < \dots < a_\ell$, so aus Exemplaren des n -Photonenraumes $\mathcal{H}_{n, S}$ gebildet, daß die Elemente

$$\alpha_{\ell, n}^{a_1 \dots a_\ell} \in \mathcal{H}_{\ell, A; n, S}^{a_1 \dots a_\ell} \quad (2.30)$$

antisymmetrisch in den Indizes $a_1, \dots, a_\ell$ sind. Das Skalarprodukt in diesem Raum lautet:

$$\begin{aligned} \langle \beta | \alpha \rangle_{\mathcal{F}} &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{\substack{a_1, \dots, a_\ell \in Q_A \\ a_1 < \dots < a_\ell}} \langle \beta_{\ell, n}^{a_1 \dots a_\ell} | \alpha_{\ell, n}^{a_1 \dots a_\ell} \rangle_n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{1}{\ell!} \sum_{a_1, \dots, a_\ell \in Q_A} \langle \beta_{\ell, n}^{a_1 \dots a_\ell} | \alpha_{\ell, n}^{a_1 \dots a_\ell} \rangle_n, \end{aligned} \quad (2.31)$$

wobei für die Komponenten $\beta_{\ell, n}^{a_1 \dots a_\ell}$, $\alpha_{\ell, n}^{a_1 \dots a_\ell}$ der Vektoren $\beta, \alpha \in \mathcal{F}$ $\langle \beta_{\ell, n}^{a_1 \dots a_\ell} | \alpha_{\ell, n}^{a_1 \dots a_\ell} \rangle_n$ das Skalarprodukt in $\mathcal{H}_{n, S}$ ist. Unter Beachtung der Definitionen (1.44), (1.45), (1.72), (1.73) hat H_I^1 die Komponenten

$$\begin{aligned} (H_I^1 \alpha)_{\ell, n}^{a_1 \dots a_\ell} (k_1, \dots, k_n) &= \\ &= \sum_{(\ell, n+1, a) \in I} \ell \sqrt{n+1} (A_\ell \otimes 1_n) \int d^3 k_\lambda M^*(a_1, a_\ell, k_\lambda) \alpha_{\ell, n+1}^{a_1, a_2 \dots a_\ell} (k_1, k_2, \dots, k_n) + \\ &+ \sum_{(\ell, n-1, a) \in I} \ell \sqrt{n} (A_\ell \otimes S_n) \left(M(a_1, a_\ell, k_\lambda) \alpha_{\ell, n-1}^{a_1, a_2 \dots a_\ell} (k_2, \dots, k_n) \right) \\ &\quad \text{für alle } (\ell, n, a_1), \dots, (\ell, n, a_\ell) \in I. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Die Summen sind dabei so zu verstehen, daß für $(1, n+1, a) \in I$ bzw. $(1, n-1, a) \in I$ der entsprechende Summand und für $(1, n+1, a) \notin I$ bzw. $(1, n-1, a) \notin I$ jeweils eine Null hinzuschreiben sind. Bei Verwendung von (1.15), (1.16), (1.54) läßt sich (2.32) auch in der folgenden Form schreiben:

$$\sum_{(i, n+1, a) \in I} \frac{1}{n+1} \sum_{i=1}^{\ell} \int d^3 k_i M^*(a_i, a; k_i) \alpha_{\ell, n+1}^{a_1 \dots a_{i-1}, a_{i+1} \dots a_{\ell}}(k_1, k_2, \dots, k_n) + \quad (2.33)$$

$$+ \sum_{(i, n-1, a) \in I} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{\ell} \sum_{\nu=1}^n M(a_i, a; k_{i\nu}) \alpha_{\ell, n-1}^{a_1 \dots a_{i-1}, a_{i+1} \dots a_{\ell}}(k_1, \dots, k_{\nu-1}, k_{\nu+1}, k_{\nu+2}, \dots, k_n).$$

Wir lassen also nichts für die Wechselwirkung wesentliches weg, das wir nicht schon durch Einführung der WWN weggelassen haben, wenn wir den Operator H_I als einen Operator auf dem Hilbertraum

$$\mathcal{H}_I = \bigoplus_{\substack{(\ell, n, a) \in I, \\ a_1 \dots a_{\ell} \in I}} \mathcal{H}_{\ell, A, n, S}^{a_1 \dots a_{\ell}} \quad (2.34)$$

auffassen. Er hat dann die Komponenten

$$\begin{aligned} (H_I \alpha_I)_{\ell, n}^{a_1 \dots a_{\ell}}(k_1, \dots, k_n) &= \\ &= \left(\sum_{i=1}^{\ell} E_{a_i}^c + \sum_{i=1}^n \omega(k_i) \right) \alpha_{\ell, n}^{a_1 \dots a_{\ell}}(k_1, \dots, k_n) + (H_I' \alpha_I)_{\ell, n}^{a_1 \dots a_{\ell}}(k_1, \dots, k_n) \end{aligned} \quad (2.35)$$

für alle $(\ell, n, a_i) \in I$, $i=1, \dots, \ell$ und $\alpha_I \in \mathcal{H}_I$.

Man sieht aus den Darstellungen (2.35), (2.32), (2.33), daß nur Wellenfunktionen mit der gleichen Elektronenzahl l in der l -ten Komponente vorkommen, d.h. daß der Elektronenzahloperator auf $\mathcal{H}_I$ mit dem Hamiltonoperator H_I vertauscht. Da H_I Zustände mit verschiedener Elektronenzahl also nicht vermischt, kann man H_I in eine direkte Summe von Hamiltonoperatoren zerlegen, die jeweils in einem Hilbertraum mit fester Elektronenzahl wirken. Daraus wiederum folgt, daß man eine solche WWN nur in einem Hilbertraum mit fester Elektronenzahl zu diskutieren braucht [34]. Wir bemerken noch, daß das WW-Verfahren, so wie es definiert worden ist, nicht davon abhängt, ob der Elektronenzahloperator mit dem Hamiltonoperator vertauscht oder nicht.

Für unsere weiteren Zwecke benötigen wir nur die Eielektronenräume

$$\mathcal{H}_I = \bigoplus_{(n,a) \in I} \mathcal{H}_n^a, \quad \mathcal{H}_n^a := \mathcal{H}_{1A, n, S}^a, \quad (2.36)$$

wobei jetzt $I \subset \mathbb{N}_0 \times \mathbb{Q}_A$ ist. Der Hamiltonoperator H_I auf $\mathcal{H}_I$, der ja nicht aus dem Eielektronenraum $\mathcal{H}_I$ hinausführt, hat die Komponenten

$$\begin{aligned} (H_I \alpha_I)_n^a(k_1, \dots, k_n) &= \left(\bar{E}_a^i + \sum_{i=1}^n \omega(k_i) \right) \alpha_n^a(k_1, \dots, k_n) + \\ &+ \sum_{(n+1, b) \in I} |\overline{n+1}| \int dt^2 |k_i| M^*(a, b; k_i) \alpha_{n+1}^b(k_i, k_1, \dots, k_n) + \\ &+ \sum_{(n-1, b) \in I} |\overline{n-1}| S_n(M(b, a; k_1) \alpha_{n-1}^b(k_2, \dots, k_n) \end{aligned} \quad (2.37)$$

für alle $(n, a) \in I$; da $A_1 = 1$ ist, haben wir der Einfachheit halber für $A_1 \otimes S_n$ nur S_n geschrieben. Die Schrödingergleichung

$$i \frac{d}{dt} \alpha_I(t) = H_I \alpha_I(t) \quad (2.38)$$

auf $\mathcal{H}_I$ ist in der Komponentenform geschrieben ein System von verkoppelten Gleichungen in den Komponenten

$$(\alpha_I(t))_n^a(k_1, \dots, k_n) =: \alpha_n^a(k_1, \dots, k_n; t), \quad (2.39)$$

das gegebenenfalls unter einer Anfangsbedingung

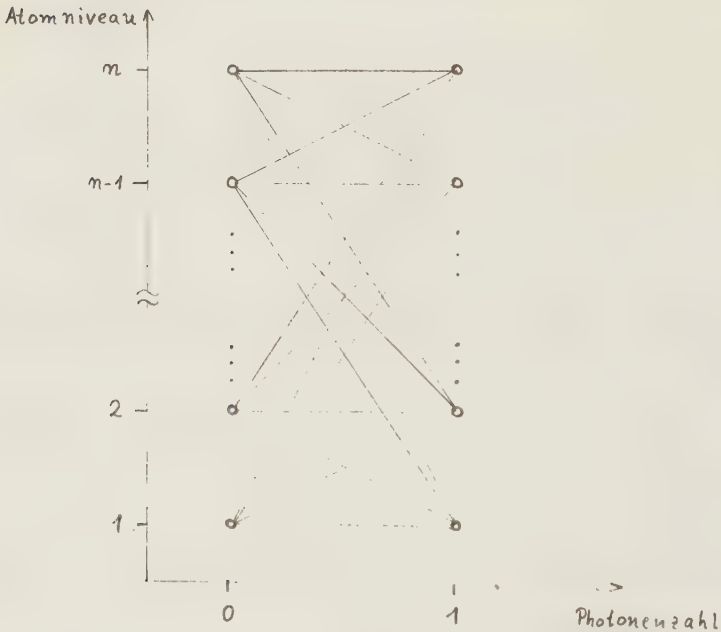
$$\alpha_n^a(k_1, \dots, k_n; 0) = \chi_n^a(k_1, \dots, k_n), \quad \chi_n^a \in \mathcal{H}_n^a, \quad (n, a) \in I \quad (2.40)$$

zur Zeit $t=0$ zu lösen ist.

II. Teil: Das entartete Zwei-Niveau Atom in Wechselwirkung ===== mit einem Photon =====

1. Zur Weisskopf-Wigner Theorie eines n-Niveau Atoms

Wir machen in diesem Abschnitt einige allgemeine Aussagen über das n-Niveau Atom, das in Wechselwirkung mit einem Photon der Masse $\mu=0$ steht. Es werden dabei sowohl alle möglichen eigentlichen und virtuellen Übergänge als auch alle Selbstenergie-Übergänge zugelassen. Entartete Niveaus sind entsprechend ihrer jeweiligen Multiplizitäten mehrfach zu zählen. Figur 2 zeigt die graphische Darstellung einer solchen WW Theorie.



Figur 2 : Graphische Darstellung einer n-Niveau WW Theorie

a) Der Wechselwirkungsoperator H_I^1

Die Indexmenge

$$I = \{(0,1), \dots, (0,n), (1,1), \dots, (1,n)\} \quad (1.1)$$

definiert diese WWN auf dem Raum

$$\mathcal{H}_I = \bigoplus_{a=1}^n \mathcal{H}_0^a \oplus \bigoplus_{a=1}^n \mathcal{H}_1^a, \quad \mathcal{H}_0^a = \mathbb{C}, \quad \mathcal{H}_1^a = L_2(K), \quad a=1, \dots, n. \quad (1.2)$$

Nach (I.2.37) hat der Wechselwirkungsteil des Hamiltonoperators die Komponenten

$$(H_I^1 \alpha_I)_0^a = \sum_{b=1}^n \int d^3k \, M^*(a, b; k) \alpha_1^b(k), \quad a=1, \dots, n, \quad (1.3)$$

$$(H_I^1 \alpha_I)_1^a(k) = \sum_{b=1}^n M(b, a; k) \alpha_0^b, \quad a=1, \dots, n. \quad (1.4)$$

Es erweist sich als günstig, zu einer Matrizendarstellung überzugehen. Sei

$$\alpha_I = \begin{pmatrix} \phi_0 \\ \Phi_1(k) \end{pmatrix} \quad (1.5)$$

der 2n-komponentige Spaltenvektor, der aus den n-komponentigen Spaltenvektoren

$$\phi_0 := \begin{pmatrix} \alpha_0^1 \\ \vdots \\ \alpha_0^n \end{pmatrix}, \quad \alpha_0^i \in \mathbb{C}, \quad i=1, \dots, n, \quad \Phi_1(k) := \begin{pmatrix} \alpha_1^1(k) \\ \vdots \\ \alpha_1^n(k) \end{pmatrix}, \quad \alpha_1^i \in L_2(K), \quad i=1, \dots, n, \quad (1.6)$$

der Null- bzw. Einphotonenamplituden gebildet wird und faßt man die Funktionen $M(a, b; k)$, $a, b=1, \dots, n$, zu der $n \times n$ -Matrixfunktion

$$\mathcal{M}(k) = \begin{pmatrix} M(1, 1; k) & \dots & M(1, n; k) \\ \vdots & & \vdots \\ M(1, n; k) & \dots & M(n, n; k) \end{pmatrix} \quad (1.7)$$

zusammen, so erhält man die Darstellung

$$H_I' \alpha_I = \begin{pmatrix} 0 & \int d^3k \mathcal{M}^+(k)_o \\ \mathcal{M}(k) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_o \\ \phi_1(k) \end{pmatrix} \quad (1.8)$$

$\mathcal{M}^+(k)$ bezeichnet die zu $\mathcal{M}(k)$ hermitesch konjugierte Matrixfunktion. Alle Multiplikationen, wie z.B. $\mathcal{M}(k)\phi_o$ und $\mathcal{M}^+(k)\phi_1(k)$ sind im Sinne der Matrizenmultiplikation zu verstehen. $\int d^3k \mathcal{M}^+(k)_o$ ist der Integraloperator $\left(\int d^3k \mathcal{M}^+(k)_o \right) \phi_1(k) = \int d^3k \left(\mathcal{M}^+(k) \phi_1(k) \right)$ mit komponentenweise vorgenommener Integration.

Beachtet man, daß die Integrale in (1.3) wegen der Quadratintegrierbarkeit der $M(a,b)$ für alle $a,b=1,\dots,n$ nichts anderes als Skalarprodukte in $L_2(\mathbb{K})$ sind, so läßt sich $H_I' \alpha_I$ auch in der Form

$$H_I' \alpha_I = \sum_{b=1}^n \begin{pmatrix} \langle M(1,b) | \alpha_1^b \rangle_1 \\ \vdots \\ \langle M(n,b) | \alpha_n^b \rangle_1 \\ M(b,1; k) \alpha_o^b \\ \vdots \\ M(b,n; k) \alpha_o^b \end{pmatrix} \quad (1.9)$$

schreiben. Jede Funktion $M(a,b;k) \alpha_o^b$, $a,b=1,\dots,n$, $\alpha_o^b \in \mathbb{C}$ ist eine Funktion aus $L_2(\mathbb{K})$, und für beliebige $\alpha_1^b \in L_2(\mathbb{K})$, $b=1,\dots,n$, sind $\langle M(a,b) | \alpha_1^b \rangle_1$, $a,b=1,\dots,n$, wohldefinierte $\mathbb{C}$ -Zahlen, so daß H_I' ein überall definierter, beschränkter Operator ist. Sein Wertebereich $R(H_I')$ wird von den Vektoren

$$\beta_i = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \leftarrow i\text{-te Stelle}, \quad \gamma_i = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ M(i,1; k) \\ \vdots \\ M(i,n; k) \end{pmatrix}, \quad i=1,\dots,n, \quad (1.10)$$

die mit α_I die Skalarprodukte

$$\langle \beta_i | \alpha_I \rangle = \alpha_i^* \quad , \quad \langle \gamma_i | \alpha_I \rangle = \sum_{b=1}^n \int d^3 k \, M^*(i, b; k) \alpha_i^b(k) \quad (1.11)$$

bilden, aufgespannt:

$$H_I^1 \alpha_I = \sum_{i=1}^n \left[\langle \gamma_i | \alpha_I \rangle \beta_i + \langle \beta_i | \alpha_I \rangle \gamma_i \right] . \quad (1.12)$$

Aus dieser Form erkennt man sofort, daß H_I^1 symmetrisch und damit wegen seiner Beschränktheit sogar selbstadjungiert ist, denn alle Erwartungswerte

$$\langle \alpha_I | H_I^1 \alpha_I \rangle = \sum_{i=1}^n \left[\langle \gamma_i | \alpha_I \rangle \langle \alpha_I | \beta_i \rangle + \langle \beta_i | \alpha_I \rangle \langle \alpha_I | \gamma_i \rangle \right] \quad (1.13)$$

sind offensichtlich reell.

Das Spektrum des Operators H_I^1 , der zur Klasse der entarteten Operatoren gehört [21], besteht nur aus endlich vielen Eigenwerten. H_I^1 hat immer den Eigenwert Null, der unendlichfach entartet ist, denn im Hilbertraum $\mathcal{H}_I$ gibt es unendlich viele zueinander orthogonale Vektoren ^{$\tilde{\alpha}_I$} , die alle orthogonal zu dem endlichdimensionalen Raum $R(H_I^1)$ sind und für die nach (1.12) $H_I^1 \tilde{\alpha}_I = 0$ gilt. Alle Eigenvektoren $\alpha_{E'}$, die zu Eigenwerten $E' \neq 0$ gehören, sind wegen $\alpha_{E'} = \frac{1}{E'} H_I^1 \alpha_{E'}$ Elemente des Wertebereichs von H_I^1 , $R(H_I^1)$. Da $R(H_I^1)$ höchstens $2n$ -dimensional ist, folgt, daß es höchstens $2n$ von Null verschiedene Eigenwerte gibt; mehrfache Eigenwerte werden dabei ihren Multiplizitäten entsprechend mehrfach gezählt.

Bemerkenswert ist, daß H_I^1 immer eine gerade Anzahl von Eigenwerten $E' \neq 0$ besitzt, derart, daß mit E' immer auch $-E'$ Eigenwert von H_I^1 ist. Dazu betrachten wir das Quadrat von H_I^1 , die $2n \times 2n$ -Matrix

$$(H_I^1)^2 = \begin{pmatrix} \int d^3 k \mathcal{M}^\dagger(k) \mathcal{M}(k) & 0 \\ 0 & \mathcal{M}(k) \int d^3 k \mathcal{M}^\dagger(k) \circ \end{pmatrix}, \quad (1.14)$$

deren Elemente wieder Operatoren sind. Der Operator $(H_I^1)^2$, der die Eigenwerte E'^2 besitzt, ist die orthogonale Summe der Operatoren

$$B_0 := \int d^3 k \mathcal{M}^\dagger(k) \mathcal{M}(k), \quad B_1 := \mathcal{M}(k) \int d^3 k \mathcal{M}^\dagger(k) \circ, \quad (1.15)$$

wobei B_0 nur im Nullphotonenraum $\bigoplus_{\alpha=1}^{\infty} \mathcal{H}_\alpha^\infty$ und B_1 nur im Einphotonenraum $\bigoplus_{\alpha=1}^{\infty} \mathcal{H}_\alpha^1$ wirkt. Ein Eigenvektor $\phi_{E'} \in \mathcal{H}_1^1$ zum Eigenwert E'^2 der hermiteschen $n \times n$ -Matrix B_0 liefert für $(H_I^1)^2$ den Eigenvektor $\alpha_{E'}^{(1)} = \begin{pmatrix} \phi_{E'} \\ 0 \end{pmatrix}$ zum Eigenwert E'^2 . Außerdem ist auch der von $\alpha_{E'}^{(1)}$ linear unabhängige Vektor

$$\alpha_{E'}^{(2)} := H_I^1 \alpha_{E'}^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 \\ \mathcal{M}(k) \phi_{E'} \end{pmatrix} \quad (1.16)$$

wegen

$$H_I^1 \alpha_{E'}^{(2)} = E'^2 \alpha_{E'}^{(2)}, \quad (H_I^1)^2 \alpha_{E'}^{(2)} = E'^2 \alpha_{E'}^{(2)} \quad (1.17)$$

ein Eigenvektor von $(H_I^1)^2$ zum gleichen Eigenwert E'^2 . Man prüft nun leicht die Beziehung

$$H_I^1 (\pm E' \alpha_{E'}^{(1)} + \alpha_{E'}^{(2)}) = \pm E' (\pm E' \alpha_{E'}^{(1)} + \alpha_{E'}^{(2)}) \quad (1.18)$$

nach, die besagt, daß $\pm E' \alpha_{E'}^{(1)} + \alpha_{E'}^{(2)}$ ein Eigenvektor zum Eigenwert $+E'$ und $-E' \alpha_{E'}^{(1)} + \alpha_{E'}^{(2)}$ ein Eigenvektor zum Eigenwert $-E'$ des Operators H_I^1 ist. Damit haben wir ein praktisches Verfahren in der Hand, um aus den Eigenwerten und Eigenvektoren der Matrix B_0 diejenigen des Operators H_I^1 zu bestimmen, und wir erhalten auf diese Weise alle seine Eigenwerte und Eigenvektoren.

b) Konstanz des kontinuierlichen Spektrums von H_I

Der gesamte Hamiltonoperator H_I auf $\mathcal{H}_I$ ist die Summe des freien Hamiltonoperators

$$\begin{aligned} (H_I^0 \alpha_I)^\alpha &= E_\alpha^0 \alpha_\alpha^\alpha, \quad (H_I^0 \alpha_I)^\alpha(k) = (E_\alpha^0 + k) \alpha_\alpha^\alpha(k), \quad \alpha=1, \dots, n, \\ \alpha_I \in \mathcal{D}(H_I^0) &= \{ \alpha_I \in \mathcal{H}_I, \quad \|H_I^0 \alpha_I\| < \infty \}, \end{aligned} \quad (1.19)$$

den man mit der diagonalen $n \times n$ -Energiamatrix

$$\mathcal{E} = \begin{pmatrix} E_1^0 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & E_n^0 \end{pmatrix} \quad (1.20)$$

auch als die diagonale $2n \times 2n$ -Matrix

$$H_I^0 = \begin{pmatrix} \mathcal{E} & 0 \\ 0 & \mathcal{E} + k \end{pmatrix} \quad (1.21)$$

auffassen kann, und des Wechselwirkungshamiltonoperators H_I^1 :

$$H_I = H_I^0 + H_I^1, \quad \mathcal{D}(H_I) = \mathcal{D}(H_I^0). \quad (1.22)$$

Da H_I^1 beschränkt und selbstadjungiert, H_I^0 selbstadjungiert ist, sieht man hier direkt, daß auch H_I selbstadjungiert ist.

Zur Untersuchung der Frage, wie sich das Spektrum von H_I^0 unter der Störung von H_I^1 verhält, benötigen wir die Definitionen von zwei Arten beschränkter, selbstadjungierter Operatoren:

1. Ein beschränkter, selbstadjungierter Operator H auf einem unendlichdimensionalen Hilbertraum $\mathcal{H}$ ist kompakt, falls er ein reines Punktspektrum mit dem Eigenwert Null als einzigen Häufungspunkt besitzt und falls jeder Eigenwert $E \neq 0$ endliche Vielfachheit hat.

2. Ein kompakter selbstadjungierter Operator H ist aus der Spurklasse, falls die Summe der Beträge seiner Eigenwerte $E_i, i=1,2,\dots$,

endlich ist, d.h. $\sum_{i=1}^{\infty} |E_i| < \infty$.

Offensichtlich gehört wegen $\sum_{i=1}^n |E_i| < \infty$, $n < \infty$, jeder entartete Operator zur Spurklasse, so auch H_I^0 .

Wir zitieren nun die beiden entscheidenden Sätze [21]:

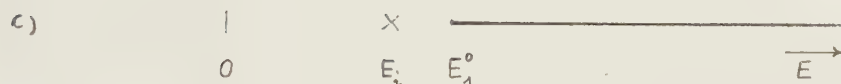
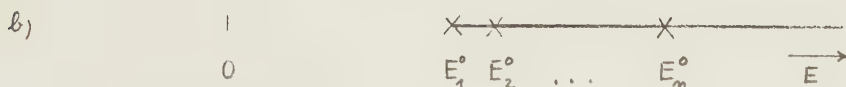
Satz 1 (H.Weyl): Sei H^0 selbstadjungiert, H' selbstadjungiert und kompakt, dann haben H^0 und $H=H^0+H'$ das gleiche wesentliche Spektrum. (Das wesentliche Spektrum ist die Vereinigung des stetigen Spektrums mit der Menge aller nichtisolierten Eigenwerte und der Menge aller Eigenwerte unendlicher Vielfachheit).

Satz 2 (T.Kato): Sei H^0 selbstadjungiert, H' selbstadjungiert und aus der Spurklasse, so haben H^0 und $H=H^0+H'$ das gleiche absolut stetige Spektrum, und die absolut stetigen Teile H_{ac}^0 , H_{ac} sind unitär äquivalent.

Unser Operator H_I^0 , der nach (1.21) eine direkte Summe von Multiplikationsoperatoren ist, $H_I^0 = (\bigoplus_{i=1}^n E_i^0) \oplus (\bigoplus_{i=1}^n (E_i^0 + k))$, hat das Spektrum $\sigma(H_I^0) = (\bigcup_{i=1}^n \sigma(E_i^0)) \cup (\bigcup_{i=1}^n \sigma(E_i^0 + k))$, d.h. es besteht aus den Eigenwerten $E_1^0 \leq E_2^0 \leq \dots \leq E_n^0$ und einem stetigen Spektrum, das sich von E_1^0 nach $+\infty$ erstreckt. Da die Operatoren $E_i^0 + k$, $i=1, \dots, n$, jeweils nur ein absolut stetiges Spektrum besitzen, fällt bei H_I^0 das stetige und das absolut stetige Spektrum zusammen. Mit den obigen Sätzen, die ja auf unseren Fall anwendbar sind, erhalten wir als Ergebnis, daß $H_I = H_I^0 + H_I'$ dasselbe stetige Spektrum wie H_I^0 hat, und daß es identisch mit seinem absolut stetigen ist. Figur 3 zeigt eine qualitative Übersicht über die Spektren von H_I^0 , H_I' und H_I .

Wir schließen 2 Bemerkungen an: 1. Es wird keine Aussage über Eigenwerte von H_I gemacht, sondern man muß sie eigens berechnen. 2. Für höhere WW-Näherungen, bei denen eine Photonenzahl größer

als Eins vorkommt, ist H_I^1 nicht mehr kompakt, das stetige Spektrum von H_I^0 kann sich dann unter der Störung von H_I^1 verschieben.



Figur 3 : Spektrum von

- a) H_I^1 : Eigenwerte $E_i^1, -E_i^1, i=1, \dots, n$, und Eigenwert 0,
- b) H_I^0 : Eigenwerte $E_i^0, i=1, \dots, n$, (absolut) stetiges Spektrum von $E=E_1^0$ bis $E=+\infty$,
- c) H_I : Mögliche Eigenwerte E_i , (absolut) stetiges Spektrum von $E=E_1^0$ bis $E=+\infty$

c) Zeitentwicklung und Resolvente

Die zeitliche Entwicklung eines Zustandes $\chi_I \in \mathcal{H}_I$, den unser physikalisches System zur Zeit $t=0$ einnimmt, erfolgt nach der Schrödingergleichung

$$i \frac{d}{dt} \alpha_I(t) = H_I \alpha_I(t) \quad , \quad \alpha_I(0) = \chi_I \quad (1.23)$$

mit dem Hamiltonoperator (1.22). Sie läßt sich formal nach dem Zustand $\alpha_I(t)$ des Systems zur Zeit t auflösen:

$$\alpha_I(t) = U_I(t) \chi_I \quad , \quad U_I(t) = e^{-i H_I t} \quad (1.24)$$

Wir stellen hier nochmals fest, daß, da ein Zeitentwicklungsoperator $U(t) = \exp(-iHt)$ genau dann unitär ist, wenn der Hamiltonoperator H selbstadjungiert ist ([37], IX,9.), unser Zeitentwicklungsoperator $U_I(t)$ unitär ist.

In praktischen Fällen ist eine direkte Integration der Gleichung (1.23) meistens nicht durchführbar, oft gelingt jedoch die Auflösung ihrer Laplacetransformierten Gleichung

$$i(s \tilde{\alpha}_I(s) - \alpha_I(0)) = H_I \tilde{\alpha}_I(s) \quad , \quad (1.25)$$

wobei $\alpha_I(s) = \int_0^\infty e^{-st} \alpha_I(t) dt$ die Laplacetransformierte von $\alpha_I(t)$ ist. Die Lösung $\alpha_I(t)$ von (1.23) ist dann die Umkehrtransformierte dieser Lösung $\alpha_I(s)$, $\alpha_I(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} e^{st} \tilde{\alpha}_I(s) ds$, $c > 0$. Setzt man in der formalen Lösung von (1.25)

$$\tilde{\alpha}_I(s) = -i (H_I - is)^{-1} \alpha_I(0) \quad (1.26)$$

$z=is$, so erhält man folgende Beziehungen zwischen dem Zeitentwicklungsoperator $U_I(t)$ und dem Operator $(H_I - z)^{-1}$:

$$(H_I - z)^{-1} = i \int_0^\infty e^{-zt} U_I(t) dt \quad , \quad U_I(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty-i\epsilon}^{+\infty+i\epsilon} e^{-izt} (H_I - z)^{-1} dz \quad (1.27)$$

Falls der Operator $R_I(z) = (H_I - z)^{-1}$ beschränkt und überall definiert ist, heißt er Resolvente von H_I im Punkte $z \in \mathbb{C}$. Die Menge $\mathcal{S}(H_I)$ aller Punkte $z \in \mathbb{C}$, für die $R_I(z)$ Resolvente ist, heißt Resolventenmenge von H_I ; das Komplement $\sigma(H_I) = \mathbb{C} \setminus \mathcal{S}(H_I)$ ist dann das Spektrum von H_I , das wegen der Selbstadjungiertheit von H_I ein Teil der reellen Achse ist. Wir bemerken noch, daß alle Erwartungswerte $\langle \alpha_I | R_I(z) | \beta_I \rangle$, $\alpha_I, \beta_I \in \mathcal{H}_I$ in $\mathcal{S}(H_I)$ holomorphe Funktionen sind, man sagt auch, daß $R_I(z)$ holomorph in $\mathcal{S}(H_I)$ ist. (1.27) besagt nun, daß sich der Zeitentwicklungsoperator als ein Integral über die Resolvente darstellen läßt, das man gegebenenfalls bei bekannter Resolvente numerisch berechnen kann.

Für unseren Fall erweist es sich als vorteilhaft, daß sich die Berechnung der Resolventen auf die Berechnung eines inversen Operators, der nur im Nullphotonenraum wirkt, zurückführen läßt. Dazu benützen wir den

Satz: Seien in den Hilberträumen $\mathcal{H}_0, \mathcal{H}_1$ die linearen Operatoren $A: \mathcal{H}_0 \rightarrow \mathcal{H}_0$, $B: \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_0$, $B^*: \mathcal{H}_0 \rightarrow \mathcal{H}_1$, $D: \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_1$ auf den Definitionsbereichen $D(A)$, $D(B) = \mathcal{H}_1$, $D(B^*) = \mathcal{H}_0$, $D(D)$ erklärt, und es existiere die Inverse D^{-1} und sie sei beschränkt und überall definiert. Die Inverse $\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & D \end{pmatrix}^{-1}$ des Operators $\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & D \end{pmatrix}$ auf $\mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1$ mit Definitionsbereich $D(A) \oplus D(D)$ existiert, ist beschränkt und überall definiert, genau dann, wenn $(A - BD^{-1}B^*)^{-1}$ existiert, beschränkt und überall definiert ist, und es gilt:

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & D \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & , & 0 \\ -D^{-1}B^* & , & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (A - BD^{-1}B^*)^{-1} & , & 0 \\ 0 & , & D^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & , & -BD^{-1} \\ 0 & , & 1 \end{pmatrix} \quad (1.28)$$

$$= \begin{pmatrix} (A - BD^{-1}B^*)^{-1} & , & -(A - BD^{-1}B^*)^{-1}BD^{-1} \\ -D^{-1}B^*(A - BD^{-1}B^*)^{-1} & , & D^{-1} + D^{-1}B^*(A - BD^{-1}B^*)^{-1}BD^{-1} \end{pmatrix} \quad (1.29)$$

Beweis: Unter den gegebenen Voraussetzungen kann man den Operator $\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & D \end{pmatrix}$ in der Form

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & BD^{-1} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A - BD^{-1}B^* & 0 \\ 0 & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ D^{-1}B^* & 1 \end{pmatrix} \quad (1.30)$$

schreiben, wobei der erste und der dritte Operator der rechten Seite überall definiert und invertierbar sind; die Inversen sind $\begin{pmatrix} 1 & -BD^{-1} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ und $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -D^{-1}B^* & 1 \end{pmatrix}$. Der zweite Operator ist genau dann invertierbar falls $A - BD^{-1}B^*$ invertierbar ist, und $\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & D \end{pmatrix}^{-1}$ ist genau dann beschränkt und überall definiert, falls dies auch für $(A - BD^{-1}B^*)^{-1}$ zutrifft.

(1.30) besitzt eine gewisse Bedeutung für die Eigenwertbestimmung, denn für einen Eigenwert E von $\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & D \end{pmatrix}$, der nicht in das Spektrum von D fällt, d.h. für $E \notin \sigma(D)$, sind die Operatoren $\begin{pmatrix} 1 & B(D-E)^{-1} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ und $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ (D-E)^{-1}B^* & 1 \end{pmatrix}$ invertierbar, und die Eigenwertgleichung

$$\begin{pmatrix} A - E & B \\ B^* & D - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0^E \\ \alpha_1^E \end{pmatrix} = 0 \quad (1.31)$$

ist äquivalent zu der Gleichung

$$\begin{pmatrix} A - E - B(D-E)^{-1}B^* & 0 \\ 0 & D - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_0^E \\ \beta_1^E \end{pmatrix} = 0 \quad (1.32)$$

mit

$$\begin{pmatrix} \beta_0^E \\ \beta_1^E \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ (D-E)^{-1}B^* & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0^E \\ \alpha_1^E \end{pmatrix}. \quad (1.33)$$

Wegen der Injektivität von $D - E$ muß $\beta_1^E = 0$ sein. Jede Lösung E , β_0^E der Gleichung

$$(A - E - B(D-E)^{-1}B^*) \beta_0^E = 0 \quad (1.34)$$

mit $E \in \mathcal{S}(D)$ bestimmt umgekehrt über

$$\begin{pmatrix} \alpha_o^E \\ \alpha_*^E \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -(D-E)^{-1} B^* & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_o^E \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta_o^E \\ -(D-E)^{-1} B^* \beta_o^E \end{pmatrix} \quad (1.35)$$

eine Lösung der Eigenwertgleichung (1.31). Wir bekommen auf diese Weise alle Eigenwerte von $\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & D \end{pmatrix}$, die nicht in das Spektrum von D fallen.

Die Resolvente $R_I(z)$ ist nun die Inverse des Operators

$$H_I - z = \begin{pmatrix} \mathcal{E} - z & \int d^3 k \mathcal{M}^+(k)_o \\ \mathcal{M}(k) & \mathcal{E} + k - z \end{pmatrix}, \quad z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}. \quad (1.36)$$

Weil $R_I^0(z) = \begin{pmatrix} (\mathcal{E} - z)^{-1} & 0 \\ 0 & (\mathcal{E} + k - z)^{-1} \end{pmatrix}$ die Resolvente des freien Hamiltonoperators darstellt, können wir die Formeln (1.28), (1.29) anwenden und erhalten so:

$$\begin{aligned} R_I(z) &= \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -(\mathcal{E} + k - z)^{-1} \mathcal{M}(k) & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha^{-1}(z) & 0 \\ 0 & (\mathcal{E} + k - z)^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -\int d^3 k \mathcal{M}^+(k)(\mathcal{E} + k - z)^{-1} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.37)$$

$$= \begin{pmatrix} \alpha^{-1}(z) & -\alpha^{-1}(z) \int d^3 k \mathcal{M}^+(k)(\mathcal{E} + k - z)^{-1} \\ -(\mathcal{E} + k - z)^{-1} \mathcal{M}(k) \alpha^{-1}(z) & (\mathcal{E} + k - z)^{-1} + (\mathcal{E} + k - z)^{-1} \mathcal{M}(k) \alpha^{-1}(z) \int d^3 k \mathcal{M}^+(k)(\mathcal{E} + k - z)^{-1} \end{pmatrix} \quad (1.38)$$

mit der z -abhängigen $n \times n$ -Matrix

$$\alpha(z) := \mathcal{E} - z - \int d^3 k \mathcal{M}^+(k)(\mathcal{E} + k - z)^{-1} \mathcal{M}(k) \quad (1.39)$$

und $\alpha^{-1}(z) = (\alpha(z))^{-1}$. Man sieht, daß die Inverse der Matrix $\alpha(z)$ schon die gesamte Resolvente von H_I bestimmt. Da alle reellen Zahlen $E \in E_1$ nicht zum Spektrum des Operators $\mathcal{E} + k$ gehören, gewinnt man nach (1.34), (1.35) alle möglichen Eigenwerte $E \in E_1$ und die dazugehörenden Eigenvektoren

$$\begin{pmatrix} \phi_o^E \\ \phi_1^E(k) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -(\mathcal{E} + k - E)^{-1} \mathcal{M}(k) & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_o^E \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi_o^E \\ -(\mathcal{E} + k - E)^{-1} \mathcal{M}(k) \phi_o^E \end{pmatrix} \quad (1.40)$$

des Hamiltonoperators H_I als Lösungen der Gleichung

$$\mathcal{K}(E) \phi_o^E = 0 \quad (1.41)$$

für $E < E_1$.

2. Weisskopf-Wigner Theorie eines entarteten Zwei-Niveau Atoms

Wir behandeln nun als Spezialfall des vorigen Abschnittes eine WW-Theorie, bei der es nur die zwei Atomniveaus E_a^0 und E_b^0 mit $\Delta = E_b^0 - E_a^0 \geq 0$ gibt, die jedoch $(2j_a+1)$ -fach bzw. $(2j_b+1)$ -fach entartet sind; im Sinne des vorigen Abschnittes hat man es daher eigentlich mit $n=2j_a+1+2j_b+1$ Niveaus zu tun. Für die Niveaus E_a^0 und E_b^0 des Atoms, das ja durch eine Diracgleichung mit Zentralpotential beschrieben wird, sollen j_a und j_b die jeweiligen Quantenzahlen des Gesamtdrehimpulses und $\mu_a \in J_a = \{-j_a, -j_a+1, \dots, +j_a\}$, $\mu_b \in J_b = \{-j_b, -j_b+1, \dots, +j_b\}$ die jeweiligen magnetischen Quantenzahlen sein.

a) Rotationsinvarianz von H_I

Bei den Spaltenvektoren (1.6) nehmen wir die Unterteilung

$$\phi_o = \begin{pmatrix} \phi_o^a \\ \phi_o^b \end{pmatrix}, \quad \phi_1(k) = \begin{pmatrix} \phi_1^a(k) \\ \phi_1^b(k) \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

in $(2j_a+1)$ -komponentige Zustände

$$\phi_o^a = \begin{pmatrix} \alpha_o^{-j_a} \\ \vdots \\ \alpha_o^{+j_a} \end{pmatrix}, \quad \phi_1^a(k) = \begin{pmatrix} \alpha_1^{-j_a}(k) \\ \vdots \\ \alpha_1^{+j_a}(k) \end{pmatrix}, \quad (2.2)$$

die sich nur auf das Niveau E_a^0 beziehen, und in $(2j_b+1)$ -komponentige Zustände

$$\Phi_0^b = \begin{pmatrix} \alpha_0^{-j_b} \\ \vdots \\ \alpha_0^{+j_b} \end{pmatrix}, \quad \Phi_1^b(\underline{k}) = \begin{pmatrix} \alpha_1^{-j_b}(\underline{k}) \\ \vdots \\ \alpha_1^{+j_b}(\underline{k}) \end{pmatrix}, \quad (2.3)$$

die sich nur auf das Niveau E_b^0 beziehen, vor. Die Funktionen $M(\mu_a, \mu'_a; \underline{k}), M(\mu_a, \mu_b; \underline{k}), M(\mu_b, \mu_a; \underline{k}), M(\mu_b, \mu'_b; \underline{k}), \mu_a, \mu'_a \in J_a, \mu_b, \mu'_b \in J_b$ fassen wir zu den folgenden Matrizen zusammen:

$$\mathcal{M}(a, a; \underline{k}) := \begin{pmatrix} M(-j_a, -j_a; \underline{k}), & \dots, & M(+j_a, -j_a; \underline{k}) \\ \vdots & & \vdots \\ M(-j_a, +j_a; \underline{k}), & \dots, & M(+j_a, +j_a; \underline{k}) \end{pmatrix}, \quad (2.4)$$

$$\mathcal{M}(a, b; \underline{k}) := \begin{pmatrix} M(-j_a, -j_b; \underline{k}), & \dots, & M(+j_a, -j_b; \underline{k}) \\ \vdots & & \vdots \\ M(-j_a, +j_b; \underline{k}), & \dots, & M(+j_a, +j_b; \underline{k}) \end{pmatrix}, \quad (2.5)$$

$$\mathcal{M}(b, a; \underline{k}) := \begin{pmatrix} M(-j_b, -j_a; \underline{k}), & \dots, & M(+j_b, -j_a; \underline{k}) \\ \vdots & & \vdots \\ M(-j_b, +j_a; \underline{k}), & \dots, & M(+j_b, +j_a; \underline{k}) \end{pmatrix}, \quad (2.6)$$

$$\mathcal{M}(b, b; \underline{k}) := \begin{pmatrix} M(-j_b, -j_b; \underline{k}), & \dots, & M(+j_b, -j_b; \underline{k}) \\ \vdots & & \vdots \\ M(-j_b, +j_b; \underline{k}), & \dots, & M(+j_b, +j_b; \underline{k}) \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

$\mathcal{M}(a, a; \underline{k})$ ist eine $(2j_a+1) \times (2j_a+1)$ -, $\mathcal{M}(a, b; \underline{k})$ eine $(2j_b+1) \times (2j_a+1)$ -, $\mathcal{M}(b, a; \underline{k})$ eine $(2j_a+1) \times (2j_b+1)$ -, $\mathcal{M}(b, b; \underline{k})$ eine $(2j_b+1) \times (2j_b+1)$ -Matrixfunktion. $\mathcal{M}^+(a, a; \underline{k}), \mathcal{M}^+(a, b; \underline{k}), \mathcal{M}^+(b, a; \underline{k}), \mathcal{M}^+(b, b; \underline{k})$ seien die entsprechenden hermitesch konjugierten

Matrixfunktionen. Mit diesen Matrizen bekommt man für $\mathcal{M}(\underline{k})$ (1.7) die Unterteilung

$$\mathcal{M}(\underline{k}) = \begin{pmatrix} \mathcal{M}(a, a; \underline{k}) & \mathcal{M}(b, a; \underline{k}) \\ \mathcal{M}(a, b; \underline{k}) & \mathcal{M}(b, b; \underline{k}) \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

und für $\mathcal{M}^+(\underline{k})$ die Unterteilung

$$\mathcal{M}^+(\underline{k}) = \begin{pmatrix} \mathcal{M}^+(a, a; \underline{k}) & \mathcal{M}^+(a, b; \underline{k}) \\ \mathcal{M}^+(b, a; \underline{k}) & \mathcal{M}^+(b, b; \underline{k}) \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

Für die Matrizen (2.4)-(2.7) gelten, unter Verwendung der Formel (III.2.31) und mit der Bezeichnung $\xi^{(a,a)}$ bzw. $\xi^{(b,b)}$ für die $(2j_a+1) \times (2j_a+1)$ - bzw. $(2j_b+1) \times (2j_b+1)$ -Einheitsmatrix, die folgenden Eigenschaften:

$$1. \quad k^2 \sum_{\lambda=1,2} \int d^2 \Omega_{\underline{k}} \mathcal{M}^+(a, a; \underline{k}) \mathcal{M}(a, a; \underline{k}) = \left(\sum_{\mu''} k^2 \sum_{\lambda=1,2} \int d^2 \Omega_{\underline{k}} M^*(\mu_a, \mu''_a; \underline{k}) M(\mu'_a, \mu''_a; \underline{k}) \right) \\ = (\overline{m}(a_a^a | k) \delta_{\mu_a \mu'_a}) = \overline{m}(a_a^a | k) \xi^{(a,a)}, \quad (2.10)$$

$$2. \quad k^2 \sum_{\lambda=1,2} \int d^2 \Omega_{\underline{k}} \mathcal{M}^+(a, a; \underline{k}) \mathcal{M}(b, a; \underline{k}) = \delta_{j_a j_b} \delta_{\ell_a \ell_b} \overline{m}(a_a^a | k) \xi^{(a,a)}, \quad (2.11)$$

$$3. \quad k^2 \sum_{\lambda=1,2} \int d^2 \Omega_{\underline{k}} \mathcal{M}^+(a, b; \underline{k}) \mathcal{M}(a, b; \underline{k}) = \overline{m}(a_b^b | k) \xi^{(a,a)}, \quad (2.12)$$

$$4. \quad k^2 \sum_{\lambda=1,2} \int d^2 \Omega_{\underline{k}} \mathcal{M}^+(a, b; \underline{k}) \mathcal{M}(b, b; \underline{k}) = \delta_{j_a j_b} \delta_{\ell_a \ell_b} \overline{m}(a_b^b | k) \xi^{(a,a)}, \quad (2.13)$$

$$5. \quad k^2 \sum_{\lambda=1,2} \int d^2 \Omega_{\underline{k}} \mathcal{M}^+(b, a; \underline{k}) \mathcal{M}(b, a; \underline{k}) = \overline{m}(b_a^a | k) \xi^{(b,b)}, \quad (2.14)$$

$$6. \quad k^2 \sum_{\lambda=1,2} \int d^2 \Omega_{\underline{k}} \mathcal{M}^+(b, a; \underline{k}) \mathcal{M}(a, a; \underline{k}) = \delta_{j_a j_b} \delta_{\ell_a \ell_b} \overline{m}(b_a^a | k) \xi^{(a,a)}, \quad (2.15)$$

$$7. \quad k^2 \sum_{\lambda=1,2} \int d^2 \Omega_{\underline{k}} \mathcal{M}^+(b, b; \underline{k}) \mathcal{M}(b, b; \underline{k}) = \overline{m}(b_b^b | k) \xi^{(b,b)}, \quad (2.16)$$

$$8. \quad k^2 \sum_{\lambda=1,2} \int d^2 \Omega_{\underline{k}} \mathcal{M}^+(b, b; \underline{k}) \mathcal{M}(a, b; \underline{k}) = \delta_{j_a j_b} \delta_{\ell_a \ell_b} \overline{m}(b_b^b | k) \xi^{(a,a)}. \quad (2.17)$$

$\int d^2 \Omega_{\underline{k}} \dots$ bedeutet Integration über den Raumwinkel im $\underline{k}$ -Raum.

Die bemerkenswerte Eigenschaft, daß die Winkelintegrationen immer zu Einheitsmatrizen, versehen mit skalaren Radialfunktionen, führen, ist eine Folge der Rotationsinvarianz des Potentials in der Diracgleichung.

Es ist nun naheliegend, zu fragen, ob sogar der Wechselwirkungsoperator $H_I = \begin{pmatrix} 0 & S d^{\frac{1}{2}}_a m t(\frac{1}{2})_0 \\ m(\frac{1}{2})_1 & 0 \end{pmatrix}$ invariant unter Drehungen ist. Dazu stellen wir erst fest, wie sich die Vektoren (2.1)-(2.3) unter einer Drehung R des Koordinatensystems verhalten. Die Einheitsvektoren $e_{a\mu_a}$, $\mu_a \in J_a$, mit den Komponenten $e_{a\mu_a}^{\mu'_a} = \delta_{\mu_a\mu'_a}$ und $e_{b\mu_b}$, $\mu_b \in J_b$, mit den Komponenten $e_{b\mu_b}^{\mu'_b} = \delta_{\mu_b\mu'_b}$, die Drehimpulsvektoren in den Hilberträumen $\mathbb{C}^{2j_a+1}$ und $\mathbb{C}^{2j_b+1}$ sind, transformieren sich gemäß den $(2j_a+1)$ -dimensionalen und $(2j_b+1)$ -dimensionalen irreduziblen Darstellungen der Drehgruppe $O(3)$ mit den unitären Drehmatrizen $D^{(j_a)}(R)$ und $D^{(j_b)}(R)$ [38, 39]. Seien $e'_{a\mu_a}$ und $e'_{b\mu_b}$ die gedrehten Einheitsvektoren und $D^a_o(R)$, $D^b_o(R)$ die entsprechenden formalen unitären Drehoperatoren, so bekommen wir die Beziehungen:

$$e'_{a\mu_a} = D^a_o(R) e_{a\mu_a} = \sum_{\mu'_a \in J_a} D^{(j_a)}_{\mu'_a\mu_a}(R) e_{a\mu'_a}, \quad e'_{b\mu_b} = D^b_o(R) e_{b\mu_b} = \sum_{\mu'_b \in J_b} D^{(j_b)}_{\mu'_b\mu_b}(R) e_{b\mu'_b}. \quad (2.18)$$

Beliebige Vektoren $\phi_o^a = \sum_{\mu_a \in J_a} \alpha_o^{\mu_a} e_{a\mu_a}$, $\alpha_o^{\mu_a} \in \mathbb{C}$, $\phi_o^b = \sum_{\mu_b \in J_b} \alpha_o^{\mu_b} e_{b\mu_b}$, $\alpha_o^{\mu_b} \in \mathbb{C}$, transformieren sich gemäß

$$\phi_o'^a = \sum_{\mu_a \in J_a} \alpha_o'^{\mu_a} e_{a\mu_a}, \quad \phi_o'^b = \sum_{\mu_b \in J_b} \alpha_o'^{\mu_b} e_{b\mu_b}, \quad (2.19)$$

wobei

$$\alpha_o'^{\mu_a} = \sum_{\mu'_a \in J_a} D^{(j_a)}_{\mu'_a\mu_a}(R) \alpha_o^{\mu'_a}, \quad \alpha_o'^{\mu_b} = \sum_{\mu'_b \in J_b} D^{(j_b)}_{\mu'_b\mu_b}(R) \alpha_o^{\mu'_b} \quad (2.20)$$

die transformierten Koeffizienten sind. Die Vektoren $\phi_1^a(k)$, $\phi_1^b(k)$

werden entsprechend transformiert, zu beachten ist jedoch, daß man auch das Argument $\underline{k}$ drehen muß:

$$\phi_1^a(\underline{k}) = \mathcal{D}_1^a(R) \phi_1^a(\underline{k}) = \sum_{\mu_a \in J_a} \alpha_1^{\mu_a}(\underline{k}) e_{\mu_a}, \quad \phi_1^b(\underline{k}) = \mathcal{D}_1^b(R) \phi_1^b(\underline{k}) = \sum_{\mu_b \in J_b} \alpha_1^{\mu_b}(\underline{k}) e_{\mu_b} \quad (2.21)$$

$$\alpha_1^{\mu_a}(\underline{k}) = \sum_{\mu_a' \in J_a} \mathcal{D}_1^{(j_a)}(R) \alpha_1^{\mu_a'}(\underline{k}'), \quad \alpha_1^{\mu_b}(\underline{k}) = \sum_{\mu_b' \in J_b} \mathcal{D}_1^{(j_b)}(R) \alpha_1^{\mu_b'}(\underline{k}'), \quad \underline{k}' = R \underline{k}. \quad (2.22)$$

Wir benötigen außerdem das Verhalten der Funktionen $M(a, b; \underline{k})$ unter Drehungen. Da ja die Funktionen $u_{a\mu_a}(\underline{x})$, $a \in Q_A$, $\mu_a \in J_a$, Drehimpulseigenfunktionen sind, sie sich also nach

$$u_{a\mu_a}(\underline{x}') = \sum_{\mu_a' \in J_a} \mathcal{D}_{\mu_a' \mu_a}^{(j_a)}(R) u_{a\mu_a'}(\underline{x}), \quad \underline{x}' = R \underline{x} \quad (2.23)$$

transformieren, erhalten wir:

$$M(\mu_b, \mu_a; \underline{k}') = \sum_{\mu_b' \in J_b} \sum_{\mu_a' \in J_a} \mathcal{D}_{\mu_b' \mu_b}^{(j_b)}(R) \mathcal{D}_{\mu_a' \mu_a}^{(j_a)*}(R) M(\mu_b', \mu_a'; \underline{k}), \quad \underline{k}' = R \underline{k}. \quad (2.24)$$

Es ist klar, daß der Drehoperator $D(R)$ auf $\mathcal{H}_I$ die Gestalt

$$D(R) = \begin{pmatrix} \mathcal{D}_0(R) & 0 \\ 0 & \mathcal{D}_1(R) \end{pmatrix}, \quad \mathcal{D}_0(R) = \begin{pmatrix} \mathcal{D}_0^a(R) & 0 \\ 0 & \mathcal{D}_0^b(R) \end{pmatrix}, \quad \mathcal{D}_1(R) = \begin{pmatrix} \mathcal{D}_1^a(R) & 0 \\ 0 & \mathcal{D}_1^b(R) \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

hat. Wir können nun leicht nachprüfen, daß

$$\mathcal{D}_1(R) \mathcal{M}(\underline{k}) \phi_0 = \mathcal{M}(\underline{k}) \mathcal{D}_0(R) \phi_0 \quad (2.26)$$

gilt, denn mit den angegebenen Transformationseigenschaften und mit der Unitarität der Drehmatrizen erhalten wir z.B.:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_1^a(R) \mathcal{M}(b, a; \underline{k}) \phi_0 &= \left(\sum_{\mu_b \in J_b} \sum_{\mu_a' \in J_a} \mathcal{D}_{\mu_a' \mu_a}^{(j_a)}(R) M(\mu_b, \mu_a'; \underline{k}') \alpha_0^{\mu_b} \right) = \\ &= \left(\sum_{\mu_b, \mu_b' \in J_b} \sum_{\mu_a', \mu_a'' \in J_a} \mathcal{D}_{\mu_a' \mu_a''}^{(j_a)}(R) \mathcal{D}_{\mu_b' \mu_b}^{(j_b)}(R) \mathcal{D}_{\mu_a'' \mu_a'}^{(j_a)*}(R) M(\mu_b', \mu_a''; \underline{k}) \alpha_0^{\mu_b} \right) = \end{aligned}$$

$$= \left(\sum_{\mu_b, \mu_a \in J_b} D_{\mu_b \mu_a}^{(j_b)}(R) M(\mu_b, \mu_a; \frac{k}{\alpha}) \alpha_0^{\mu_b} \right) = \left(\sum_{\mu_b \in J_b} M(\mu_b, \mu_a; \frac{k}{\alpha}) \alpha_0^{\mu_b} \right) = \\ = \mathcal{M}(b, a; \frac{k}{\alpha}) D_0^b(R) \phi_0^b.$$

Mit (2.26) folgt aber die Gleichung

$$D(R) H_I^1 \alpha_I = H_I^1 D(R) \alpha_I, \quad (2.27)$$

die bedeutet, daß H_I^1 mit dem Drehoperator $D(R)$ und damit auch mit dem Drehimpulsoperator vertauscht. Wir kommen also zu dem Schluß, daß H_I^1 invariant unter Drehungen ist.

Die Rotationsinvarianz von H_I^1 hat zur Folge, daß die Eigenwerte von H_I^1 entartet sind. Diese Entartung zeigt sich natürlich auch bei der Berechnung der Eigenwerte, die wir jetzt vornehmen wollen. Nach (1.14)-(1.18) genügt es, die Eigenwerte der Matrix $\mathcal{M} = \int d^3k \mathcal{M}^+(k) \mathcal{M}(k)$ zu bestimmen. Definieren wir die reellen Zahlen

$$A := \int_0^\infty dk \left(\bar{m} \left(\begin{smallmatrix} a & a \\ a & a \end{smallmatrix} | k \right) + \bar{m} \left(\begin{smallmatrix} a & b \\ a & b \end{smallmatrix} | k \right) \right), \quad (2.28)$$

$$C := \int_0^\infty dk \left(\bar{m} \left(\begin{smallmatrix} a & a \\ b & a \end{smallmatrix} | k \right) + \bar{m} \left(\begin{smallmatrix} a & b \\ b & b \end{smallmatrix} | k \right) \right), \quad (2.29)$$

$$C' := \int_0^\infty dk \left(\bar{m} \left(\begin{smallmatrix} b & a \\ a & a \end{smallmatrix} | k \right) + \bar{m} \left(\begin{smallmatrix} b & b \\ a & b \end{smallmatrix} | k \right) \right), \quad (2.30)$$

$$B := \int_0^\infty dk \left(\bar{m} \left(\begin{smallmatrix} b & a \\ b & a \end{smallmatrix} | k \right) + \bar{m} \left(\begin{smallmatrix} b & b \\ b & b \end{smallmatrix} | k \right) \right), \quad (2.31)$$

wobei wegen $\bar{m} \left(\begin{smallmatrix} a & b \\ c & d \end{smallmatrix} | k \right) = \bar{m} \left(\begin{smallmatrix} c & d \\ a & b \end{smallmatrix} | k \right)$ (Siehe III. Teil) $C' = C$ ist, und benutzen wir die Eigenschaften (2.10)-(2.17), so können wir $\mathcal{M}$ in der Form

$$\mathcal{M} = \left\{ \begin{array}{ll} \left(\begin{smallmatrix} A & C \\ C & B \end{smallmatrix} \right) \otimes \mathcal{E}^{(a,a)} & \text{für } j_a = j_b \text{ und } l_a = l_b \\ A \mathcal{E}^{(a,a)} \oplus B \mathcal{E}^{(b,b)} & \text{für } j_a \neq j_b \text{ oder } l_a \neq l_b \end{array} \right\} \quad (2.32)$$

schreiben. $\begin{pmatrix} A & C \\ C & B \end{pmatrix} \otimes \varphi^{(a,a)}$ ist das Tensor- oder Kroneckerprodukt zwischen der 2×2 -Matrix $\begin{pmatrix} A & C \\ C & B \end{pmatrix}$ und der $(2j_a+1) \times (2j_a+1)$ -Einheitsmatrix $\varphi^{(a,a)}$; $A \varphi^{(a,a)} \oplus B \varphi^{(b,b)}$ ist die orthogonale Summe der Matrizen $A \varphi^{(a,a)}$ und $B \varphi^{(b,b)}$. Die Eigenwerte E' von $\mathcal{M}$ sind Lösungen der Säkulargleichung $\det(\mathcal{M} - E') = 0$, die äquivalent zu den Gleichungen

$$\begin{aligned} [E'^2 - (A+B)E' + AB - C^2]^{2j_a+1} &= 0 \quad \text{für } j_a = j_b \text{ und } l_a = l_b \\ [A - E']^{2j_a+1} [B - E']^{2j_b+1} &= 0 \quad \text{für } j_a \neq j_b \text{ oder } l_a \neq l_b \end{aligned} \quad (2.33)$$

ist. Für $j_a = j_b$ und $l_a = l_b$ sind ^{also} die zwei Eigenwerte

$$E'_{a,b} = \frac{1}{2} (A+B \pm \sqrt{(A+B)^2 - 4(AB - C^2)}) \quad (2.34)$$

je $(2j_a+1)$ -fach entartet, und für $j_a \neq j_b$ oder $l_a \neq l_b$ sind die Eigenwerte

$$E'_a = A, \quad E'_b = B \quad (2.35)$$

$(2j_a+1)$ -fach bzw. $(2j_b+1)$ -fach entartet. Wie zu erwarten war, haben die Eigenwerte E'_a, E'_b dieselbe Entartung wie die Atomniveaus E_a^0, E_b^0 . Dagegen wird die zusätzliche Entartung beim relativistischen H-Atom aufgehoben, denn für die $2S_{1/2}$ und $2P_{1/2}$ Zustände können wir z.B. der Tabelle des IV. Teils entnehmen, daß $A = 4.6 \cdot 10^{-7}$ und $B = 5.1 \cdot 10^{-7}$ (in Einheiten der Ruheenergie des Elektrons) ist, daß also $E'_{2S_{1/2}}$ verschieden von $E'_{2P_{1/2}}$ ausfällt.

b) Gebundene Photonen

Da der freie Hamiltonoperator (1.21), in dem jetzt die Energiematrix

$$\varphi = \begin{pmatrix} E_a^0 \varphi^{(a,a)} & 0 \\ 0 & E_b^0 \varphi^{(b,b)} \end{pmatrix} \quad (2.36)$$

vorkommt, klarerweise rotationsinvariant ist, folgt, daß auch der gesamte Hamiltonoperator H_I invariant unter Drehungen ist. Wir können also wieder eine Entartung des Spektrums von H_I erwarten.

Zur Bestimmung der Eigenwerte von H_I nach (1.41) benötigen wir die Matrix $\mathcal{O}(z)$ (1.39). Definieren wir die Funktionen

$$A(z) := \int_0^\infty dk \left(\frac{\overline{m}(a a | k)}{E_a^0 + k - z} + \frac{\overline{m}(a b | k)}{E_b^0 + k - z} \right) , \quad (2.37)$$

$$C(z) := \int_0^\infty dk \left(\frac{\overline{m}(b a | k)}{E_a^0 + k - z} + \frac{\overline{m}(b b | k)}{E_b^0 + k - z} \right) , \quad (2.38)$$

$$B(z) := \int_0^\infty dk \left(\frac{\overline{m}(b a | k)}{E_a^0 + k - z} + \frac{\overline{m}(b b | k)}{E_b^0 + k - z} \right) \quad (2.39)$$

und verwenden wir die Eigenschaften (2.10)-(2.17), so können wir sie in der Form

$$\mathcal{O}(z) = \begin{cases} \begin{pmatrix} E_a^0 - z - A(z) & -C(z) \\ -C(z) & E_b^0 - z - B(z) \end{pmatrix} \otimes \mathbb{I}^{(a,a)} & \text{für } j_a = j_b \text{ und } l_a = l_b \\ (E_a^0 - z - A(z)) \mathbb{I}^{(a,a)} \oplus (E_b^0 - z - B(z)) \mathbb{I}^{(b,b)} & \text{für } j_a \neq j_b \text{ oder } l_a \neq l_b \end{cases} \quad (2.40)$$

schreiben.

Wir erwähnen, daß sich die Inverse $\mathcal{O}^{-1}(z)$ wegen $(\alpha \otimes \mathbb{Z})^{-1} = \alpha^{-1} \otimes \mathbb{Z}^{-1}$ und $(\alpha \otimes \mathbb{Z})^{-1} = \alpha^{-1} \otimes \mathbb{Z}^{-1}$ für zwei invertierbare Matrizen leicht berechnen läßt:

$$\mathcal{O}^{-1}(z) = \frac{1}{D(z)} \mathcal{O}_{ad}(z) \quad (2.41)$$

mit

$$D(z) := (E_a^0 - z - A(z))(E_b^0 - z - B(z)) - \delta_{j_a j_b} \delta_{l_a l_b} (C(z))^2 \quad (2.42)$$

und mit der Matrix

$$\alpha_{ad}(z) = \begin{cases} \begin{pmatrix} E_b^c - z - B(z), & C(z) \\ C(z) & E_a^c - z - A(z) \end{pmatrix} \otimes \mathcal{E}^{(a,a)} & \text{für } j_a = j_b \text{ und } l_a = l_b \\ (E_b^c - z - B(z)) \mathcal{E}^{(l_a, l_a)} \oplus (E_a^c - z - A(z)) \mathcal{E}^{(l_b, l_b)} & \text{für } j_a \neq j_b \text{ oder } l_a \neq l_b \end{cases} \quad (2.43)$$

die bis auf einen Faktor von Potenzen von $D(z)$ die zu $\alpha(z)$ adjungierte Matrix ist. Nach (1.37), (1.38) haben wir somit auch die Resolvente $R_I(z)$ vollständig bestimmt.

Eigenwerte $E < E_a^0$ müssen nach (1.41) Lösungen der Gleichung $\det \alpha(E) = 0$ sein. Mit (2.40) erhalten wir die in E nichtlinearen Gleichungen

$$\begin{aligned} [(E_a^c - E - A(E))(E_b^c - E - B(E)) - (C(E))^2]^{2j_a+1} &= 0 \quad \text{für } j_a = j_b \text{ und } l_a = l_b, \\ [E_a^c - E - A(E)]^{2j_a+1} [E_b^c - E - B(E)]^{2j_b+1} &= 0 \quad \text{für } j_a \neq j_b \text{ oder } l_a \neq l_b, \end{aligned} \quad (2.44)$$

aus denen man schon ablesen kann, daß die möglichen Eigenwerte auf jeden Fall entartet sind. (2.44) lösen wir graphisch, indem wir die Schnittpunkte der Funktion $(E_a^0 - E - A(E))(E_b^0 - E - B(E))$ mit der Funktion $\delta_{j_a j_b} \delta_{l_a l_b} (C(E))^2$ für $E < E_a^0$ aufsuchen, wobei zu beachten ist, daß $A(E)$, $B(E)$, für $E < E_a^0$ reelle, ^{positive,} ^{wachsende} Funktionen sind, und daß die positive Funktion $|C(E)|$ den Grenzwert Null für $E \rightarrow -\infty$ hat. In der Figur 4 sehen wir, daß es immer einen Schnittpunkt E_a gibt, und daß für $A(E_a^0)(B(E_a^0) - \Delta) \geq \delta_{j_a j_b} \delta_{l_a l_b} (C(E_a^0))^2$ ein zweiter, E_b , vorhanden ist. Das bedeutet, daß H_I immer einen Eigenwert E_a , der $(2j_a+1)$ -fach entartet ist, hat, und daß es für

$$\Delta \leq \varepsilon_{ab}^1, \quad \varepsilon_{ab}^1 := B(E_a^c) - \delta_{j_a j_b} \delta_{l_a l_b} \frac{(C(E_a^c))^2}{A(E_a^c)}, \quad (2.45)$$

Die Eigenvektoren

$$\alpha_{\mathbb{I}E_a} = \begin{pmatrix} \phi_{0E_a} \\ \phi_{1E_a}(\underline{k}) \end{pmatrix}, \quad \alpha_{\mathbb{I}E_b} = \begin{pmatrix} \phi_{0E_b} \\ \phi_{1E_b}(\underline{k}) \end{pmatrix}, \quad (2.46)$$

die man über (1.40), (1.41) mit (2.40) für $E=E_a, E_b$ erhält, lauten im Falle $j_a=j_b$ und $l_a=l_b$

$$\phi_{0E_a} = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{E_a^0 - E_a - A(E_a)}{C(E_a)} \end{pmatrix} \otimes \phi_0^a, \quad \phi_{1E_a}(\underline{k}) = -(\ell + k - E_a)^{-1} \mathcal{M}(\underline{k}) \phi_{0E_a}, \quad (2.47)$$

$$\phi_{0E_b} = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{E_b^0 - E_b - A(E_b)}{C(E_b)} \end{pmatrix} \otimes \phi_0^b, \quad \phi_{1E_b}(\underline{k}) = -(\ell + k - E_b)^{-1} \mathcal{M}(\underline{k}) \phi_{0E_b} \quad (2.48)$$

und im Falle $j_a \neq j_b$ oder $l_a \neq l_b$

$$\phi_{0E_a} = \begin{pmatrix} \phi_0^a \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \phi_{1E_a}(\underline{k}) = -(\ell + k - E_a)^{-1} \mathcal{M}(\underline{k}) \phi_{0E_a}, \quad (2.49)$$

$$\phi_{0E_b} = \begin{pmatrix} 0 \\ \phi_0^b \end{pmatrix}, \quad \phi_{1E_b}(\underline{k}) = -(\ell + k - E_b)^{-1} \mathcal{M}(\underline{k}) \phi_{0E_b}, \quad (2.50)$$

wobei ϕ_0^a und ϕ_0^b beliebige Vektoren aus $\mathbb{C}^{2j_a+1}$ bzw. $\mathbb{C}^{2j_b+1}$ sind. Durch geeignete Wahl der ϕ_0^a bzw. ϕ_0^b bekommt man $2j_a+1$ bzw. $2j_b+1$ linear unabhängige Vektoren, so daß wir alle Eigenzustände für E_a bzw. E_b gefunden haben.

Die physikalische Interpretation dieser Eigenzustände muß man wie in [18] vornehmen. Ein solcher Eigenzustand ist ein untrennbares Konglomerat aus entsprechenden atomaren Zuständen, wobei kein Photon vorhanden ist, und entsprechenden atomaren Zuständen unter Anwesenheit gerade eines Photons. Im Gegensatz zu [18] tritt jedoch jeweils eine Mischung der entarteten Zustände $u_{a\mu_a}(\underline{x})$, $\mu_a \in J_a$, bzw. $u_{b\mu_b}(\underline{x})$, $\mu_b \in J_b$ auf. Dieses Photon ist mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit für immer an das Atom gebunden,

denn als Teil eines echten Eigenzustandes des Gesamtsystems "zerfließt" es nicht im Laufe der Zeit, wie dies etwa ein abgestrahltes Photon tut. Da dieses gebundene Photon vom Atom nicht abgelöst oder sonst irgendwie wegbewegt werden kann, können wir es also auch von außen nicht "sehen". Seine Bindungsenergie ist durch die Absenkung des ungestörten Eigenwertes E_a^0 zu E_a bzw. E_b gegeben, d.h. durch $-(E_a^0 - E_a)$ bzw. $-(E_a^0 - E_b)$.

Um eine Vorstellung zu gewinnen, wie weit sich die Eigenwerte E_a , E_b von den ungestörten Eigenwerten E_a^0 , E_b^0 entfernt befinden, wollen wir die Lösungen der Gleichung (2.44) näherungsweise bestimmen, und zwar der Einfachheit halber für den Fall $j_a \neq j_b$ oder $l_a \neq l_b$. Da die Funktionen $\bar{m}_{a,b}^{(a,b)}(k)$ ihre Maximalwerte bei Energien haben, die etwa dem reziproken Atomdurchmesser (Bohrradius $\hat{=} 5.6$ keV!) entsprechen (Siehe Zeichnungen im IV. Teil!), stimmen für Energiedifferenzen $E_a^0 - E > 0$, die im optischen Bereich liegen, die Integrale $\int_0^\infty dk \bar{m}_{a,b}^{(a,b)}(k)/(E_a^0 + k - E)$, $\int_0^\infty dk \bar{m}_{a,b}^{(a,b)}(k)/(E_b^0 + k - E)$, $\int_0^\infty dk \bar{m}_{a,b}^{(a,b)}(k)/k = \bar{\epsilon}_{ab}$ (III.2.36) sehr gut überein. Daher sind

$$A(E) \simeq \bar{\epsilon}_{aa} + \bar{\epsilon}_{ab}, \quad B(E) \simeq \bar{\epsilon}_{ab} + \bar{\epsilon}_{bb} \quad (2.51)$$

und

$$\bar{E}_a \simeq E_a^c - (\bar{\epsilon}_{aa} + \bar{\epsilon}_{ab}), \quad \bar{E}_b \simeq E_b^c - (\bar{\epsilon}_{ab} + \bar{\epsilon}_{bb}) \quad (2.52)$$

sehr gute Näherungen. Zahlenwerte der $\bar{\epsilon}_{ab}$ findet man für einige Übergänge des Wasserstoffatoms in Teil IV. Sie sind alle von der Größenordnung des Lambshifts, also klein gegenüber optischen Übergangsenergien.

Wir bemerken noch, daß für das $2S_{1/2} - 2P_{1/2}$ -System kurioserweise die Eigenwertdifferenz $E_b - E_a = \bar{\epsilon}_{aa} - \bar{\epsilon}_{bb} = (15.54 - 8.62) \times 10^{-12} [m_e c^2] =$

$8.62 \times 10^{-12} [m_e c^2]$ bis auf einen Fehler von 1% mit dem beobachteten Lambshift $\Delta_L = 8.57 \times 10^{-12} [m_e c^2]$ übereinstimmt. Damit zeigt sich auch, daß die zusätzliche Entartung beim Dirac'schen Wasserstoffatom durch die Photonwechselwirkung aufgehoben wird.

c) Emissionslinie im Fall $\Delta \gg \epsilon'_{ab}$

Ein Photon, das das WW-System abstrahlt, wird sich nach langer Zeit t , d.h. physikalisch nach einer Zeit, die groß gegenüber der Lebensdauer des zerfallenden atomaren Zustandes ist, und mathematisch für $t \rightarrow \infty$, nachdem es also die Wechselwirkungszone des Atoms verlassen hat, wie ein freies Photon gemäß der Zeitentwicklung $U_I^0(t) = \exp(-iH_I^0 t)$ bewegen und ausbreiten. Das bedeutet, daß einem Anfangszustand $\chi \in \mathcal{H}_I$, $\chi = \begin{pmatrix} \chi_0 \\ \chi_1(k) \end{pmatrix}$, bei $t=0$ über die asymptotische Relation

$$e^{-iH_I t} \chi \sim e^{-iH_I^0 t} \chi_+ \quad \text{für } t \rightarrow \infty \quad (2.53)$$

ein Zustand $\chi_+ \in \mathcal{H}_I$, $\chi_+ = \begin{pmatrix} \chi_{c+} \\ \chi_{n(k)} \end{pmatrix}$, zugeordnet ist. Diese Zuordnung wird ausgedrückt durch einen linearen Operator Ω_{I+} ,

$$\chi_+ = \Omega_{I+} \chi \quad (2.54)$$

der mathematisch durch den Grenzwert

$$\Omega_{I+} = s\text{-}\lim_{t \rightarrow +\infty} e^{iH_I^0 t} e^{-iH_I t} \quad (2.55)$$

definiert ist. Wir wollen hier nicht näher auf die mathematische Theorie des Møller- oder Wellenoperators Ω_{I+} [21,40] eingehen.

Das Wellenpaket $\chi_{1+}(k)$ dieses "asymptotischen" Photons, das definierte Energie- und Winkelverteilungen hat, bekommt man mit (1.27) auch, indem man vom Photonanteil der Resolvente $R_I(z)$ denjenigen der freien Resolvente $R_I^0(z)$ abfaktorisiert und im Rest die Grenzwerte $z \rightarrow x+i0$ an den entsprechenden reellen singu-

lären Stellen x von $R_I^0(z)$ bildet [40,41]. Für einen beliebigen Anfangszustand $\chi \in \mathcal{X}_I$ haben die Bildvektoren $\bar{\Phi}(z)$ der Resolvente $R_I(z)$, $\bar{\Phi}(z) = R_I(z)\chi$, nach (1.38) die Form

$$\bar{\Phi}_0(z) = \mathcal{U}^{-1}(z) \left[\chi_0 - \int d^3 k \mathcal{M}^+(k) (\xi + k - z)^{-1} \chi_1(k) \right], \quad (2.56)$$

$$\bar{\Phi}_1(k; z) = (\xi + k - z)^{-1} \left[-\mathcal{M}(k) \bar{\Phi}_0(z) + \chi_1(k) \right]. \quad (2.57)$$

Bei unserem Zwei-Niveau Atom müssen wir nun die Grenzwerte

$$\Phi_{0+}(E_a^c + k) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \bar{\Phi}_0(E_a^c + k + i\varepsilon), \quad \Phi_{0+}(E_b^c + k) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \bar{\Phi}_0(E_b^c + k + i\varepsilon), \quad (2.58)$$

betrachten, also diejenigen der Matrix $\mathcal{U}^{-1}(z)$ und des Vektors

$$\varphi_0(z) = \chi_0 - \int d^3 k \mathcal{M}^+(k) (\xi + k - z)^{-1} \chi_1(k). \quad \text{Dann ist } \chi_{1+}(k) = \begin{pmatrix} \chi_{1+}^a(k) \\ \chi_{1+}^b(k) \end{pmatrix} \text{ mit}$$

$$\chi_{1+}^a(k) = -\mathcal{M}(a, a; k) \Phi_{0+}^a(E_a^c + k) - \mathcal{M}(b, a; k) \Phi_{0+}^b(E_b^c + k) + \chi_1^a(k), \quad (2.59)$$

$$\chi_{1+}^b(k) = -\mathcal{M}(a, b; k) \Phi_{0+}^a(E_a^c + k) - \mathcal{M}(b, b; k) \Phi_{0+}^b(E_b^c + k) + \chi_1^b(k) \quad (2.60)$$

das Wellenpaket des asymptotisch freien Photons. Nach (2.41) gehen in (2.58) direkt die Grenzwerte von $D(z)$,

$$D_+(E_a^c + k) = (k + A_+(E_a^c + k)) \left(k - \Delta + B_+(E_a^c + k) \right) - \int_{\lambda b} \int_{k a} \left(C_+(E_a^c + k) \right)^2, \quad (2.61)$$

$$D_+(E_b^c + k) = (k + \Delta + A_+(E_b^c + k)) \left(k + B_+(E_b^c + k) \right) - \int_{\lambda b} \int_{k b} \left(C_+(E_b^c + k) \right)^2, \quad (2.62)$$

ein, wobei die Grenzwerte $A_+(E_a^c + k)$ usw. der Funktionen (2.37)-(2.39) komplexwertige Funktionen von k sind, die man am einfachsten mit Hilfe der Distributionsbeziehung $(x \pm i0)^{-1} = P \frac{1}{x} \mp i\delta(x)$ berechnen kann.

Für die weiteren Untersuchungen wollen wir jetzt $\Delta \gg \varepsilon_{ab}^i$ voraussetzen. Da die Funktionen $A_+(E_a^c + k)$ usw. schon für optische

Frequenzen k betragsmäßig wesentlich kleiner als k sind (Siehe Zeichnungen im IV. Teil!), tragen sie in (2.61), (2.62) nur wesentlich an den Stellen $k=0$ und $k=\Delta$ bei. Für optische Frequenzen Δ wird daher der Betrag von $1/D_+(E_a^0+k)$ bei $k=\Delta$ sehr groß werden, derjenige von $1/D_+(E_b^0+k)$ dagegen wird bei $k=\Delta$ schon sehr stark abgefallen sein, so daß nur $\chi_1^a(k)$ eine ausgeprägte Resonanzlinie zeigt, während $\chi_1^b(k)$ nur bei $k=0$ merkbar wird, also im wesentlichen ein rotes Photon darstellt. Das ist auch physikalisch verständlich, denn das Atom macht hauptsächlich einen Übergang von dem energetisch höher gelegenen Niveau E_b^0 zu dem energetisch tieferen Niveau E_a^0 unter Emission eines Photons, dessen Energie bei $k=\Delta = E_b^0 - E_a^0$ konzentriert ist. Aus den erwähnten Gründen können wir den letzten Term in (2.61) vernachlässigen und die anderen Funktionen durch ihre Werte an der Stelle $k=\Delta$ nähern; außerdem wird nur die Funktion $\phi_{0+}^b(E_a^0+k)$ die Linienform liefern.

Wir beschränken uns nun der Einfachheit halber auf den Fall der spontanen Emission, $\chi_1(k)=0$, die Resultate gelten jedoch auch für die allgemeinen Fälle. Wir erhalten die sehr gute Näherung

$$\phi_{0+}^b(E_a^0+k) \cong \frac{1}{k-\Delta+B_+(\bar{E}_a^0+\Delta)} \chi_0^b, \quad (2.63)$$

$$B_+(\bar{E}_a^0+\Delta) = \Delta' + i\Gamma/2, \quad (2.64)$$

$$\Delta' := \mathcal{P} \int_0^\infty dk \frac{\overline{m}(b^a|k)}{k-\Delta} + \int_0^\infty dk \frac{\overline{m}(b^b|k)}{k}, \quad (2.65)$$

$$\Gamma := 2\pi \overline{m}(b^a|\Delta). \quad (2.66)$$

Analog zu (2.51) erhalten wir weiterhin:

$$\Delta' \cong \bar{\varepsilon}_{ab} + \bar{\varepsilon}_{bb}. \quad (2.67)$$

Das spontan emittierte Photon

$$\chi_{1+}^a(k) \cong - \frac{1}{k - \Delta - \Delta' + i \frac{\Gamma}{2}} \mathcal{M}(b, a; k) \chi_0^b$$

$$\chi_{1+}^b(k) \cong 0 \quad (2.68)$$

besitzt wegen $|\chi_{1+}^a(k)|^2 \sim \frac{1}{|k - \Delta - \Delta' + i \frac{\Gamma}{2}|^2} = \frac{1}{(k - \Delta - \Delta')^2 + (\frac{\Gamma}{2})^2}$ eine Energieverteilung nach einer Lorentzkurve. Diese Lorentzlinie hat ihr Maximum bei $k = \Delta - \Delta'$, d.h. es ist um die Linienverschiebung Δ' von der Bohr'schen Energie Δ nach unten verschoben, und sie hat eine Linienbreite Γ . (2.67) besagt, daß die Linienverschiebung praktisch identisch ist mit der Verschiebung des Eigenwertes E_b^0 zu E_b im Fall $\Delta < \epsilon'_{ab}$ (2.52). Sie ist also in der Größenordnung des Lambshifts und damit klein gegenüber Δ .

Die Funktionen (2.61), (2.62) wie auch die Linienverschiebung Δ' und die Linienbreite Γ besitzen eine bemerkenswerte Eigenschaft. Da in ihnen nur die spingemittelten Funktionen $\bar{m}_{b,a}^{(b,a)}(k)$ usw. vorkommen, enthalten sie automatisch die statistische Mittelungsprozedur.

Die Linienform des Photons (2.68) ist unabhängig von der Wahl der Anfangsbedingung $\chi_0^b \in \mathcal{C}^{2j_b+1}$. Für die Energieverteilung des emittierten Photons ist es egal, in welchem der $(2j_b+1)$ Zustände des entarteten Niveaus E_b^0 sich das Atom zur Zeit $t=0$ befunden hatte. Diese "Entartung" der Emissionslinie ist wieder eine Folge der Rotationsinvarianz des Hamiltonoperators H_I . Dabei ist dieses Ergebnis unabhängig von der Näherung in (2.68), denn für die Linie ist nur der Faktor $1/D_+(E_a^0+k)$ maßgebend und wir haben immer noch die Freiheit der Wahl von $(2j_b+1)$ linear unabhängigen Vektoren χ_0^b .

d) Vernachlässigung der Spinflipübergänge

Wir betrachten jetzt den wichtigen Spezialfall bei dem keine Wechselwirkung der entarteten Niveaus jeweils untereinander stattfindet. Wir bekommen ihn am einfachsten, indem wir im Hamiltonoperator H_I die Matrizen $\mathcal{M}(a, a; k)$ und $\mathcal{M}(b, b; k)$ Null setzen:

$$H_I = \begin{pmatrix} E_a^0 \varphi^{(a,a)} & 0 & 0 & \int d^3k \mathcal{M}^+(a, b; k)_c \\ 0 & E_b^0 \varphi^{(b,b)} & \int d^3k \mathcal{M}^+(b, a; k)_c & 0 \\ 0 & \mathcal{M}(b, a; k) & (E_a^0 + k) \varphi^{(a,a)} & 0 \\ \mathcal{M}(a, b; k) & 0 & 0 & (E_b^0 + k) \varphi^{(b,b)} \end{pmatrix} \quad (2.69)$$

Durch geeignete Zeilen- und Spaltenvertauschung sehen wir, daß

$$H_I = H_I^{ab} \oplus H_I^{ba} \quad (2.70)$$

eine orthogonale Summe der Teiloperatoren

$$H_I^{ab} = \begin{pmatrix} E_a^0 \varphi^{(a,a)} & \int d^3k \mathcal{M}^+(a, b; k)_c \\ \mathcal{M}(a, b; k) & (E_b^0 + k) \varphi^{(b,b)} \end{pmatrix}, \quad (2.71)$$

$$H_I^{ba} = \begin{pmatrix} E_b^0 \varphi^{(b,b)} & \int d^3k \mathcal{M}^+(b, a; k)_c \\ \mathcal{M}(b, a; k) & (E_a^0 + k) \varphi^{(a,a)} \end{pmatrix} \quad (2.72)$$

ist. Auch Resolvente, Zeitentwicklungsoperator und Wellenoperatoren sind orthogonale Summen: $R_I(z) = R_I^{ab}(z) \oplus R_I^{ba}(z)$, $U_I(t) = U_I^{ab}(t) \oplus U_I^{ba}(t)$, $\Omega_{I+} = \Omega_{I+}^{ab} \oplus \Omega_{I+}^{ba}$.

H_I^{ab} beschreibt gerade alle virtuellen Übergänge zwischen E_a^0 und E_b^0 , was sich auch darin äußert, daß das Spektrum von H_I^{ab} immer den Eigenwert E_a enthält. H_I^{ba} dagegen beschreibt für $\Delta \gg \bar{\varepsilon}_{ab}$,

$\bar{\varepsilon}_{ab} = \int_0^\infty dk \bar{m}_{b,a}^{(b,a)}(k)/k$, "normale" Übergänge zwischen E_a^0 und E_b^0 , verbunden mit Emissionslinien und Lebensdauern; für $\Delta < \varepsilon_{ab}$ besitzt H_I^{ba} den Eigenwert E_b , der wie in b) zu gebundenen Photonen führt.

Für H_I^{ba} können wir im "gewöhnlichen" Fall $\Delta \gg \varepsilon_{ab}$ den Wellenoperator Ω_{I+}^{ba} mit geringen Modifikationen direkt von [18] übernehmen:

$$\Omega_{I+}^{ba} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -\frac{1}{D_+(E_a^0+k)} m(b,a;k) e^{i\omega a} + \frac{1}{D_+(E_b^0+k)} m(b,a;k) \int d^3k' m^*(b,a;k') \chi(k'-k-i0)^+ & 0 \end{pmatrix} \quad (2.73)$$

wobei jetzt

$$D(z) = E_b^0 - z - B(z), \quad B(z) = \int_0^\infty dk \frac{\bar{m}_{b,a}^{(b,a)}(k)}{E_b^0 + k - z}, \quad (2.74)$$

ist. Jedes spontan emittierte Photon im Fernfeld, $\begin{pmatrix} 0 \\ \chi_{I+}^{ba}(k) \end{pmatrix} = \Omega_{I+}^{ba} \begin{pmatrix} \chi_b^b \\ 0 \end{pmatrix}$, hat hier exakt die Gestalt

$$\chi_{I+}^{ba}(k) = - \frac{1}{\Delta - k - B_+(E_a^0+k)} m(b,a;k) \chi_b^b. \quad (2.75)$$

Seine Linienform, die ja durch $1/(\Delta - k - B_+(E_a^0+k))$ bestimmt wird, ist unabhängig von der Anfangsbedingung χ_b^b , so daß sie also exakt $(2j_b+1)$ -fach "entartet" ist.

Da $\bar{m}_{b,a}^{(b,a)}(k)$ durch Mittelung über μ_b und Summation über μ_a der Funktionen $m_{b,a}^{(b,a)}(k)$ entstanden ist (III.2.31), kann man das durch H_I^{ba} gegebene, entartete Zwei-Niveau Atom in Bezug auf die Energieverteilung des abgestrahlten Photons wie ein gewöhnliches, nichtentartetes Zwei-Niveau Atom betrachten, vorausgesetzt man ersetzt $m_{b,a}^{(b,a)}(k)$ durch die spingemittelten Funktionen $\bar{m}_{b,a}^{(b,a)}(k)$.

III. Teil: Analytische Berechnung von WW-Funktionen für relativistische wasserstoffähnliche Atome

In sämtlichen WW-Theorien spielen die Übergangselemente $M(a, b; \underline{k})$ (I.2.5) eine zentrale Rolle: (1) Wie schon erwähnt, ist für die Existenz von WW-Theorien die Quadratintegrierbarkeit erforderlich. Daraus folgt unmittelbar, daß eine Dipol- oder Multipolnäherung, die man in (I.2.5) durch Ersetzung von $e^{i\underline{k}\underline{x}}$ durch eine endliche Summe $\sum_{l=0}^n (i\underline{k}\underline{x})^l / l!$, $n < \infty$, erhält, in WW-Theorien nicht zulässig ist [12, 18]. (2) In höheren WW-Theorien ist es unumgänglich Sekundärnäherungen zur Lösung der Schrödingergleichung zu machen [42], deren Begründungen von den Eigenschaften der $M(a, b; \underline{k})$ abhängen.

Daher ist es notwendig exakte analytische Berechnungen der WW-Funktionen $M(a, b; \underline{k})$ und $m(\frac{a}{c}, \frac{b}{d} | \underline{k})$ durchzuführen. Dies soll hier am Beispiel der relativistischen wasserstoffähnlichen Atome, deren Wellenfunktionen ja genau bekannt sind, geschehen.

1. Einige Bezeichnungen

Führen wir die Vektorfunktion $\underline{\Gamma}(a, b; \underline{k}) = (\underline{\Gamma}^*(a, b; \underline{k}))^*$ mit

$$\underline{\Gamma}^*(a, b; \underline{k}) = \frac{c}{(\mathcal{L}_a(\underline{k}))^{1/2} (2\pi)^{3/2}} \int d^3x e^{i\underline{k}\underline{x}} u_a^+(\underline{x}) \times u_b(\underline{x}) \quad (1.1)$$

ein, so ist $M^*(a, b; \underline{k}) = \underline{\xi}(\underline{k}) \cdot \underline{\Gamma}^*(a, b; \underline{k})$. Für die allgemeinen Radialfunktionen

$$m(\frac{a}{c}, \frac{b}{d} | \underline{k}) = k^2 \sum_{\lambda, \lambda'} \int d\mathcal{L}_k M^*(a, b; \underline{k}) M(c, d; \underline{k}) \quad (1.2)$$

erhält man mit der Polarisationssumme

$$\sum_{\lambda, \lambda'} \varepsilon_i(\underline{k}, \lambda) \varepsilon_j(\underline{k}, \lambda) = \delta_{ij} - \hat{k}_i \hat{k}_j, \quad \hat{k}_i = \frac{k_i}{|\underline{k}|}, \quad (1.3)$$

den Ausdruck

$$m\left(\begin{smallmatrix} a & b \\ c & d \end{smallmatrix} \middle| k\right) = k^2 \int d\Omega_k \left[\Gamma^*(a, b, k) \cdot \Gamma(c, d, k) - (\hat{k} \cdot \Gamma^*(a, b, k)) (\hat{k} \cdot \Gamma(c, d, k)) \right] \quad (1.4)$$

$\int d\Omega_k \dots$ bedeutet Integration über den Raumwinkel im k -Raum.

Häufig kommen von (1.2) die Spezialfälle

$$m(a, b \middle| k) := m\left(\begin{smallmatrix} a & b \\ a & b \end{smallmatrix} \middle| k\right) \quad (1.5)$$

vor. Die mit den Funktionen (1.2) gebildeten Integrale

$$\varepsilon\left(\begin{smallmatrix} a & b \\ a & b \end{smallmatrix}\right) = \int_0^\infty dk \frac{m\left(\begin{smallmatrix} a & b \\ a & b \end{smallmatrix} \middle| k\right)}{k} \quad (1.6)$$

sind Energieausdrücke, deren Spezialfälle

$$\varepsilon_{ab} := \varepsilon\left(\begin{smallmatrix} a & b \\ a & b \end{smallmatrix}\right) \quad (1.7)$$

die in [18] erwähnten Schwellenergien sind.

Zur Berechnung der erklärten Größen benötigen wir die Eigenfunktionen $u_a(\underline{x})$ des Diracoperators H_D^m . Bekanntlich separiert für ein Zentralpotential $V(\underline{x})=V(r)$, $r=|\underline{x}|$, die Diracgleichung in Kugelkoordinaten, so daß eine Eigenfunktion $u(\underline{x})$ die Form [43]

$$u_{n,j\ell}^u(\underline{x}) = \begin{pmatrix} f_{nj\ell}(r) \chi_{j\ell}^u(\hat{\underline{x}}) \\ i f_{nj\ell}(r) \chi_{j\ell}^u(\hat{\underline{x}}) \end{pmatrix}, \quad \hat{\underline{x}} := \frac{\underline{x}}{|\underline{x}|} \quad (1.8)$$

hat; $j, l, s=1/2$ ($j=l\pm 1/2$) sind die Quantenzahlen des Gesamt-, Bahn-, Spin-Drehimpulses des Elektrons, $l'=2j-l$, μ ist die magnetische Quantenzahl ($\mu=-j, -j+1, \dots, +j$), und n ist die Hauptquantenzahl. Die Kugelspinoren $\chi_{j\ell}^u$, die auf der Fläche der Einheitskugel normiert sind,

$$\int d\Omega_x \left(\chi_{j_1 \ell_1}^u(\hat{\underline{x}}) \right)^* \chi_{j_2 \ell_2}^u(\hat{\underline{x}}) = \delta_{j_1 j_2} \delta_{\ell_1 \ell_2} \delta_{\mu_1 \mu_2} \quad (1.9)$$

haben mit den Einheitsspinoren $\chi^{\pm \frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \chi^{\mp \frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ und den normier-

ten Kugelfunktionen $Y_{lm}(\hat{x})$ die Darstellung

$$\chi_{j\ell}^{\mu}(\hat{x}) = \sum_{m, \mu_s} C_{\ell m \mu_s}^{j\mu} Y_{\ell m}(\hat{x}) \chi^{\mu_s} \quad (1.10)$$

wobei $C_{\ell m \mu_s}^{j\mu}$ die Clebsch-Gordan-Koeffizienten sind.

Die reellen Radialfunktionen f, g , die der radialen Gleichung

$$\frac{d}{dr} \begin{pmatrix} f(r) \\ g(r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\kappa-1}{r} & -(\bar{E}-V(r)-1) \\ \bar{E}-V(r)+1 & -\frac{\kappa+1}{r} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f(r) \\ g(r) \end{pmatrix}, \quad (1.11)$$

$$\kappa = \begin{cases} j+\frac{1}{2} & \text{für } \ell = j+\frac{1}{2} \\ -(j+\frac{1}{2}) & \text{für } \ell = j-\frac{1}{2} \end{cases}, \quad (1.12)$$

und der Normierung

$$\int_0^{\infty} dr r^2 [f^2(r) + g^2(r)] = 1 \quad (1.13)$$

genügen, lauten für das Coulombpotential $V(r) = -\frac{Z\alpha}{r} [43]$:

$$g(r) = N(1+E)^{1/2} (2\lambda r)^{n'-1} e^{-\lambda r} \left[-n' F_1(-n'+1, 2j+1; 2\lambda r) + (W-\kappa) F_1(-n', 2j+1; 2\lambda r) \right] \quad (1.14)$$

$$f(r) = -N(1-E)^{1/2} (2\lambda r)^{n'-1} e^{-\lambda r} \left[n' F_1(-n'+1, 2j+1; 2\lambda r) + (W-\kappa) F_1(-n', 2j+1; 2\lambda r) \right] \quad (1.15)$$

Dabei ist

$$n = n' + j + 1/2, \quad n' = 0, 1, 2, \dots \quad \text{die Zahl der Knoten von } f, g, \quad (1.16)$$

$$J = \sqrt{(j+\frac{1}{2})^2 - (Z\alpha)^2} = \sqrt{\kappa^2 - (Z\alpha)^2}, \quad (1.17)$$

$$W = \sqrt{(n'+j)^2 + (Z\alpha)^2}, \quad (1.18)$$

$$\lambda = \sqrt{1-E^2} = \frac{Z\alpha}{W}, \quad (1.19)$$

$$E^0 = E_{nj}^0 = \left[1 + \frac{Z\alpha}{n-j-\frac{1}{2} + \sqrt{(j+\frac{1}{2})^2 - (Z\alpha)^2}} \right]^{-2} = \frac{n'+J}{W} \quad \text{der} \quad (1.20)$$

Energieeigenwert,

$$N = \frac{(2\lambda)^{3/2}}{w^2 \cdot \Gamma(2p+1)} \left[\frac{2 \cdot \Gamma(2p+n+1)}{n! (w-\lambda)} \right]^{1/2} \text{ die Normierungskonstante, } (1.21)$$

$\Gamma(z)$ die Gammafunktion, ${}_1F_1(a, b; z)$ die konfluente hypergeometrische Funktion.

Eigenschaften der hypergeometrischen Funktion ${}_pF_q(a_p, b_q; z)$, die über die Reihe

$${}_pF_q(a_p, b_q; z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a_1)_n \dots (a_p)_n}{(b_1)_n \dots (b_q)_n} \frac{z^n}{n!} \quad (1.22)$$

$$(a)_n = a(a+1) \dots (a+n-1) = \frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(a)}, \quad (a)_0 = 1, \quad (1.23)$$

eingeführt werden kann, findet man z.B. in [44].

2. Berechnung von $M^*(a, b; k)$ und $m_{c,d}^{(a,b)}(k)$

Da die Wasserstoffwellenfunktionen in Kugelkoordinaten vorliegen, wird man zweckmäßigerweise auch die Integration (1.1) in diesen Koordinaten durchführen. Dazu führt man in (1.1) die "Drehimpuls"-Entwicklung

$$e^{i \underline{k} \cdot \underline{x}} = \frac{(2\pi)^{3/2}}{(kr)^1} \sum_{L=0}^{\infty} \sum_{M=-L}^{+L} i^L J_{L+1/2}(kr) Y_{LM}(\hat{\underline{x}}) Y_{LM}^*(\hat{\underline{k}}) \quad (2.1)$$

nach halbzahligen Besselfunktionen $J_{L+1/2}(kr)$ und Kugelfunktionen ein und vertauscht dann die Summation mit der Integration, was wegen der gleichmäßigen Konvergenz von (2.1) erlaubt ist:

$$\int_{\Omega}^* (a, b; \underline{k}) = \frac{ie}{(2k \omega(k))} \sum_{L=0}^{\infty} \sum_{M=-L}^{+L} i^L Y_{LM}^*(\hat{\underline{k}}) \times \quad (2.2)$$

$$\times \left[F_L(a, b; k) \int d\Omega_{\hat{\underline{x}}} (\chi_{j_a l_a}^{\mu_a}(\hat{\underline{x}}))^* \sigma Y_{LM}(\hat{\underline{x}}) \chi_{j_b l_b}^{\mu_b}(\hat{\underline{x}}) - F_L(b, a; k) \int d\Omega_{\hat{\underline{x}}} (\chi_{j_b l_b}^{\mu_b}(\hat{\underline{x}}))^* \sigma Y_{LM}(\hat{\underline{x}}) \chi_{j_a l_a}^{\mu_a}(\hat{\underline{x}}) \right]$$

$\underline{\sigma}$ ist der Vektor der Paulimatrizen (I.1.6). Die reellen Radialfunktionen $F_L(a, b; k)$, $F_L(b, a; k)$, a bzw. b bezeichnet hier die Zusammenfassung (n_a, j_a, l_a) bzw. (n_b, j_b, l_b) , sind als die Radial-

integrale

$$F_L(a, b; k) = \int_0^\infty dr r^{3/2} g_a(r) f_b(r) J_{L+1/2}(kr) \quad (2.3)$$

definiert, wobei im allgemeinen $F_L(a, b; k) \neq F_L(a, b; k)$ ist. Die Integrale (2.3) werden wir im nächsten Abschnitt berechnen.

Zur Berechnung der Winkelintegrale in (2.2) wird es sich als günstig erweisen sphärische Komponenten für die Vektoren $\underline{a}$ und $\underline{b}$ einzuführen. Ist $\underline{a} \in \mathbb{R}^3$ ein Vektor mit den kartesischen Komponenten a_x, a_y, a_z , so sind

$$a_{1\pm 1} := \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (a_x \pm i a_y), \quad a_{10} := a_z \quad (2.4)$$

seine sphärischen Komponenten [39]. Man nennt a_{1p} , $p=0, \pm 1$, auch einen sphärischen Tensor 1-ter Stufe. Aus den sphärischen Komponenten a_{1p} eines Vektors gewinnt man über

$$a_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_{1-1} - a_{1+1}), \quad a_y = \frac{i}{\sqrt{2}} (a_{1-1} + a_{1+1}), \quad a_z = a_{10} \quad (2.5)$$

die kartesischen zurück. Das Skalarprodukt zweier Vektoren $\underline{a}, \underline{b}$ läßt sich durch die sphärischen Komponenten ausdrücken:

$$\underline{a} \cdot \underline{b} = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z = \sum_p (-1)^p a_{1p} b_{1-p}, \quad (2.6)$$

Die sphärischen Komponenten des Vektors der Paulimatrizen sind die reellen Matrizen

$$\sigma_{1+1} = -\sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_{1-1} = \sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_{10} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

Die σ_{1p} als auch die Kugelfunktionen Y_{LM} sind im Sinne der Theorie der zusammengesetzten Drehimpulse irreduzible Tensoroperatoren [39] von 1-ter bzw. L-ter Stufe. Sei

$$Q_{JM} = (-1)^{J+m} (2J+1)^{1/2} \sum_{p, l} \begin{pmatrix} 1 & L & J \\ -p & -l & m \end{pmatrix} \sigma_{1p} Y_{lM} \quad (2.8)$$

das "Tensorprodukt" [39] der Operatoren σ_{1p} und Y_{LM} , wobei wir statt der Clebsch-Gordan-Koeffizienten die Wigner'schen $3j$ -Symbole $\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$ benutzen, so läßt sich das gewöhnliche Produkt $\sigma_{1p} Y_{LM}$ durch die Q_{JM} ausdrücken:

$$\sigma_{1p} Y_{LM} = \sum_{Jm} (-1)^{J+m} (2J+1)^{1/2} \begin{pmatrix} 1 & L & J \\ -p & -M & m \end{pmatrix} Q_{Jm} \quad (2.9)$$

Fassen wir die Kugelspinoren χ_{je}^m als die Ketvektoren $|sljm\rangle$, $s=1/2$, auf, so sind die sphärischen Komponenten der Winkelintegrale (2.2) nichts anderes als die Matricelemente

$$\begin{aligned} \langle sl_a j_a m_a | \sigma_{1p} Y_{LM} | sl_b j_b m_b \rangle, \\ \langle sl_a j_a m_a | \sigma_{1p} Y_{LM} | sl_b j_b m_b \rangle, \quad p = 0, \pm 1. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Man setzt (2.9) ein und verwendet das Wigner-Eckart-Theorem für die Matricelemente von Q_{JM} :

$$\langle \frac{1}{2} l_a j_a m_a | Q_{Jm} | \frac{1}{2} l_b j_b m_b \rangle = (-1)^{j_a - m_a} \begin{pmatrix} j_a & J & j_b \\ -m_a & m & m_b \end{pmatrix} \langle \frac{1}{2} l_a j_a || Q_J || \frac{1}{2} l_b j_b \rangle. \quad (2.11)$$

Die reduzierten Matricelemente von Q_{JM} lassen sich durch die reduzierten Matricelemente der Einzeloperatoren [39]

$$\langle \frac{1}{2} || \sigma_1 || \frac{1}{2} \rangle = 2 \sqrt{\frac{3}{2}} \quad (2.12)$$

$$\langle l_a || Y_L || l_b \rangle = (-1)^{l_a} \left[\frac{(2l_a+1)(2l_b+1)(2L+1)}{4\pi} \right]^{1/2} \begin{pmatrix} l_a & L & l_b \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

ausdrücken [39]:

$$\langle \frac{1}{2} l_a j_a || Q_J || \frac{1}{2} l_b j_b \rangle = \langle \frac{1}{2} || \sigma_1 || \frac{1}{2} \rangle \langle l_a || Y_L || l_b \rangle \left[(2j_a+1)(2j_b+1)(2J+1) \right]^{1/2} \begin{pmatrix} j_a & j_b & J \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1 \\ l_a & l_b & L \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

wobei die geschweifte Klammer ein $9j$ -Symbol ist. Mit diesen Umformungen können wir nun die sphärischen Komponenten des Vektors $\Gamma^*(a, b; k)$ in der Form

$$\Gamma_{1p}^* (a, b; \underline{k}) = \quad (2.14)$$

$$\frac{ie(-1)^{j_a+j_b}}{(2k\omega(k))} \sum_L \sum_{j_m} i^L (-1)^{j+m} (2j+1) \begin{pmatrix} j_a & j & j_b \\ -j_a & m & j_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & L & j \\ -p & -m & m \end{pmatrix} G_{Lj}(a, b, k) Y_{LM}^*(\hat{k})$$

schreiben, wobei

$$G_{Lj}(a, b; k) := \quad (2.15)$$

$$F_L(a, b; k) (2j+1)^{-\frac{1}{2}} \langle \frac{1}{2} j_a j_a \| \hat{a}_j \| \frac{1}{2} j_b j_b \rangle - F_L(b, a; k) (2j+1)^{-\frac{1}{2}} \langle \frac{1}{2} j_a j_a \| \hat{a}_j \| \frac{1}{2} j_b j_b \rangle$$

reelle Radialfunktionen sind.

Zur Auswertung von (1.4) benötigen wir den longitudinalen Anteil von $\Gamma^*(a, b; \underline{k})$, das Skalarprodukt von $\Gamma^*(a, b; \underline{k})$ mit dem Einheitsvektor $\hat{k}$, der die sphärischen Komponenten

$$\hat{k}_{1p} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{1p}(\hat{k}) \quad (2.16)$$

hat:

$$\begin{aligned} \hat{k}_{1p} \cdot \Gamma^*(a, b; \underline{k}) &= \sum_p (-1)^p \hat{k}_{1p} \Gamma_{1-p}^*(a, b; \underline{k}) = \\ &= \frac{ie(-1)^{j_a+j_b}}{(2k\omega(k))} \sum_L \sum_{j_m} i^L (-1)^j (2j+1) \begin{pmatrix} j_a & j & j_b \\ -j_a & m & j_m \end{pmatrix} G_{Lj}(a, b, k) \times \\ &\times \left[\sqrt{\frac{4\pi}{3}} \sum_{p=M} (-1)^{p+M} \begin{pmatrix} 1 & L & j \\ p & -M & m \end{pmatrix} Y_{1p}(\hat{k}) Y_{LM}^*(\hat{k}) \right] \end{aligned} \quad (2.17)$$

Ersetzen wir in der M-Summe M durch -M und beachten, daß $Y_{L-L}^* = (-1)^M Y_{LM}$ und $p-M+m=0$ ist, so erhalten wir

$$\sqrt{\frac{4\pi}{3}} \sum_{p=M} \begin{pmatrix} 1 & L & j \\ p & M & m \end{pmatrix} Y_{1p}(\hat{k}) Y_{LM}(\hat{k}) \quad (2.18)$$

für die eckige Klammer in (2.17). Da sich ein Produkt zweier Kugelfunktionen in eine Summe von einzelnen Kugelfunktionen gemäß der Formel [39]

$$Y_{\ell_1 m_1}(\hat{k}) Y_{\ell_2 m_2}(\hat{k}) = \sum_{\ell_3 m_3} \left[\frac{(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)(2\ell_3+1)}{4\pi} \right]^{1/2} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} Y_{\ell_3 m_3}^*(\hat{k}) \quad (2.19)$$

zerlegen läßt, kann man (2.18) in der Form

$$\sum_{\ell_3 m_3} \left[(2L+1)(2\ell_3+1) \right]^{1/2} \begin{pmatrix} 1 & L & \ell_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} Y_{\ell_3 m_3}^*(\hat{k}) \sum_{pM} \begin{pmatrix} 1 & L & J \\ p & M & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & L & \ell_3 \\ p & M & m_3 \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

schreiben. Benutzen wir jetzt die Orthogonalitätsrelation für die 3j-Symbole

$$\sum_{m_1 m_2} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3' \\ m_1 & m_2 & m_3' \end{pmatrix} = \frac{1}{(2j_3+1)} \delta_{j_3 j_3'} \delta_{m_3 m_3'} \quad (2.21)$$

so ergibt sich:

$$(2.18) = \frac{[(2L+1)(2J+1)]^{1/2}}{2J+1} \begin{pmatrix} 1 & L & J \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} Y_{Jm}^*(\hat{k}). \quad (2.22)$$

Damit lautet der longitudinale Anteil von $\Gamma_{\infty}^*(a, b; k)$:

$$\hat{k} \cdot \Gamma_{\infty}^*(a, b; \hat{k}) = \quad (2.23)$$

$$\frac{ie(-1)^{j_a-j_b}}{(2k\omega(k))} \sum_L \sum_{j_m} i^L (-1)^J [(2J+1)(2L+1)]^{1/2} \begin{pmatrix} j_a & J & j_b \\ -m_a & m & m_b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & L & J \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} G_{LJ}(a, b; k) Y_{Jm}^*(\hat{k}).$$

Nun können wir die Winkelintegration (1.4) ausführen:

$$\begin{aligned} m \begin{pmatrix} 1 & b \\ c & d \end{pmatrix} &= \\ &= (-1)^{j_a-j_b+j_c-j_d} \frac{e^i k_z}{2k(k_z)} \sum_{L'L'} \sum_{j_m} (2J+1) [(2L+1)(2L'+1)]^{1/2} \begin{pmatrix} j_a & J & j_b \\ -m_a & m & m_b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_c & J & j_d \\ -m_c & m & m_d \end{pmatrix} \times \\ &\times G_{LJ}(a, b; k) G_{L'J}(c, d; k) i^L (-i)^{L'} \left[\frac{1}{2L+1} \hat{c}_{LL} - \begin{pmatrix} 1 & L & J \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & L' & J \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right]. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Die eckige Klammer in (2.24) läßt sich mit Hilfe der Orthogonalitätsrelation (2.21) und der Symmetriebeziehung

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

umformen zu

$$\frac{1}{2L+1} \delta_{LL'} - \begin{pmatrix} 1 & L & J \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & L' & J \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \sum_{m_1, m_2} \begin{pmatrix} 1 & L & J \\ m_1 & 0 & m_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & L' & J \\ m_1 & 0 & m_2 \end{pmatrix} = \quad (2.26)$$

$$\begin{pmatrix} 1 & L & J \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & L' & J \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & L & J \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & L' & J \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} = [1 + (-1)^{L+L'}] \begin{pmatrix} 1 & L & J \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & L' & J \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Außerdem können wir noch den Faktor $i^L (-i)^{L'} [1 + (-1)^{L+L'}]$ umschreiben:

$$i^L (-i)^{L'} [1 + (-1)^{L+L'}] = e^{i\frac{\pi}{2}L} e^{-i\frac{\pi}{2}L'} [1 + e^{i\pi(L+L')}] = \quad (2.27)$$

$$e^{i\frac{\pi}{2}(L-L')} + e^{-i\frac{\pi}{2}(L-L')} = 2 \cos \frac{\pi}{2}(L-L'),$$

$$\cos \frac{\pi}{2}(L-L') = \begin{cases} 0 & \text{für } L-L' = \pm 1, \pm 3, \dots \\ (-1)^{\frac{L-L'}{2}} & \text{für } L-L' = 0, \pm 2, \pm 4, \dots \end{cases} \quad (2.28)$$

Wir erhalten schließlich das Resultat:

$$m \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} | k \rangle =$$

$$= (-1)^{j_a - j_c + j_b - j_d} \frac{e^2 k}{\omega(k)} \sum_{L'} \sum_{J'} \cos \frac{\pi}{2}(L-L') [2J+1] [(2L+1)(2L'+1)]^{1/2} \begin{pmatrix} j_a & j & j_a \\ -\mu_a & m & \mu_a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_c & J & j_d \\ -\mu_c & m & \mu_d \end{pmatrix} \times \quad (2.29)$$

$$\times \begin{pmatrix} 1 & L & J \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & L' & J \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} G_{LJ}(a, b; k) G_{L'J}(c, d; k).$$

Wir führen nun eine Reihe von Eigenschaften der WW-Funktionen $M^*(a, b; k)$ und $m \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} | k \rangle$ auf, die von den Eigenschaften der 3j- und 9j-Symbole herrühren. Nach den Regeln der Drehimpulsaddition folgt, daß alle 3j-Symbole $\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$, die die Bedingungen

- 1) $j_3 \in \{|j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2\}$ (Dreiecksbedingung),
 - 2) $m_1 + m_2 + m_3 = 0$,
 - 3) $j_i \geq |m_i|$, $i=1, 2, 3$
- (2.30)

nicht erfüllen, Null sein müssen. Falls alle drei magnetischen Quantenzahlen m_i , $i=1, 2, 3$, in dem 3j-Symbol Null sind, so muß wegen (2.25) zusätzlich die Summe $j_1 + j_2 + j_3$ eine gerade Zahl sein.

Das reduzierte Matricelement $\langle l_a \| Y_L \| l'_b \rangle$ ist daher nur dann von Null verschieden, wenn neben der Einhaltung der Auswahlregeln (2.30) $l_a + l'_b + L$ eine gerade Zahl, bzw. $l_a + l'_b + L$ ($l'_b = 2j_b - l_b$!) eine ungerade Zahl ist. In einem 9j-Symbol muß jede Zeile und jede Spalte die Dreiecksbedingung erfüllen. Außerdem ändert sich bei Vertauschung von zwei Zeilen bzw. von zwei Spalten das 9j-Symbol nur um den Vorzeichenfaktor $(-1)^{\sum j}$, wobei $\sum j$ die Summe über alle j des 9j-Symbols ist.

Damit können wir die folgenden Eigenschaften herleiten:

1) Wegen der Auswahlregeln für die 3j- und 9j-Symbole sind alle Summen in (2.14) und (2.29) endlich.

2) Es gelten die Symmetriebeziehungen

$$a) G_{LJ}(a, b; k) = (-1)^{j_a + j_b + J + \ell_a + \ell_b} G_{LJ}(b, a; k),$$

$$b) \Gamma_{1p}(a, b; k) = (-1)^{\ell_a + \ell_b + 1} (-1)^p \Gamma_{1-p}^*(b, a; k),$$

$$c) M(a, b; k) = (-1)^{\ell_a + \ell_b + 1} M^*(b, a; k) \quad (\text{Diese Relation folgt auch direkt aus der Parität } (-1)^{\ell_a + \ell_b + 1} \text{ des Stromausdrucks } u_a^+(\underline{x}) \underline{x} u_b(\underline{x})!).$$

3) In (2.14) sind m und M durch $m = \mu_a - \mu_b$, $M = \mu_a - \mu_b - p$ festgelegt.

4) In (2.29) gilt $m = \mu_b - \mu_a = \mu_c - \mu_d$.

5) In (2.14) müssen L und J den Auswahlregeln

$$a) J \in \{|j_a - j_b|, |j_a - j_b| + 1, \dots, j_a + j_b\},$$

$$b) L \in \{|l_a - l'_b|, |l_a - l'_b| + 2, \dots, l_a + l'_b\} \text{ bzw.}$$

$$L \in \{|l_a - l_b|, |l'_a - l'_b| + 2, \dots, l'_a + l'_b\}$$

(Hier geht die Dreiecksbedingung und die Bedingung

$$l_a + l'_b + L = \text{gerade bzw. } l'_a + l'_b + L = \text{gerade ein}),$$

$$c) L \in \{|J - 1|, J, J + 1\}$$

genügen

6) In (2.29) müssen zusätzlich zu 5) die Auswahlregeln

- a) $J \geq 1$,
 b) $J \in \{|j_c - j_d|, |j_c - j_d| + 1, \dots, j_c + j_d\}$,
 c) $L' \in \{|l_c - l'_d|, |l_c - l'_d| + 2, \dots, l_c + l'_d\}$ bzw.
 $L' \in \{|l'_c - l_d|, |l'_c - l_d| + 2, \dots, l'_c + l_d\}$,
 d) $L' \in \{|J-1|, J, J+1\}$,
 e) $L - L' \in \{-2, 0, +2\}$ für festes J (wegen (2.28)!)
 erfüllt sein.
- 7) Aus 5)b), 6)c) und 6)e) folgt, daß die Zahlen $l_a + l_b$ und $l_c + l_d$ entweder beide gerade oder beide ungerade sein müssen.
- 8) Alle Funktionen $m(\begin{smallmatrix} a, b \\ c, d \end{smallmatrix} | k)$ sind reell.

In vielen WW-Theorien, wie z.B. in der in Teil II behandelten, sind in den Funktionen (2.29) die Zustände $u_b(\underline{x})$ und $u_d(\underline{x})$ gleich und es wird über die Spineinstellungen dieser Zustände summiert. Aus der Orthogonalität (2.21) folgt dann, daß für $\sum_{\mu_c} m(\begin{smallmatrix} a, c \\ b, c \end{smallmatrix} | k) \neq 0$ die Gleichheiten $j_a = j_b$ und $\mu_a = \mu_b$ notwendig sind. Dann können sich l_a und l_b höchstens um 1 unterscheiden ($l = j \pm \frac{1}{2}$!), d.h. $l_a - l_b \in \{-1, 0, +1\}$, und mit der Bedingung 7) ist sogar $l_a = l_b$ notwendig. Wir erhalten also

$$\sum_{\mu_c} m(\begin{smallmatrix} a & c \\ b & c \end{smallmatrix} | k) = \delta_{j_a j_b} \delta_{\mu_a \mu_b} \delta_{\mu_c \mu_b} \overline{m}(\begin{smallmatrix} a & c \\ b & c \end{smallmatrix} | k) \quad (2.31)$$

mit

$$\begin{aligned} \overline{m}(\begin{smallmatrix} a & c \\ b & c \end{smallmatrix} | k) &= \frac{1}{2j_a + 1} \frac{c^2 k}{\omega(k)} \sum_{L' J} \sum_j c_{\frac{\pi}{2}}(L-L') (2j+1) \left[(2L+1)(2L'+1) \right]^{1/2} \times \\ &\times \begin{pmatrix} 1 & L & J \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & L' & J \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \dot{G}_{LJ}(a, c; k) \dot{G}_{L'J}(b, c; k) . \end{aligned} \quad (2.32)$$

Sind weitere Atomzustände gleich, so bekommt man die Spezialfälle

$$\bar{m}(a, b; k) := \bar{m} \left(\begin{smallmatrix} a & b \\ a & b \end{smallmatrix} \middle| k \right) = \quad (2.33)$$

$$\frac{1}{2j_a+1} \frac{e^2 k}{\omega(k)} \sum_{L'} \sum_j i^{\frac{\pi}{2}(L-L')(2j+1)} \left[\frac{(2L+1)(2L'+1)}{(2L+1)(2L'+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1 & L & j \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & L' & j \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} G_{Lj}(a, b; k) G_{L'j}(a, b; k)$$

und

$$\bar{m}(a, a; k) = \frac{1}{2(2j_a+1)} \frac{e^2 k}{\omega(k)} \sum_j (2j+1) [G_{jj}(a, a; k)]^2. \quad (2.34)$$

Schließlich definieren wir noch analog zu (1.6), (1.7) die spingemittelten Schwellenergien

$$\bar{\varepsilon} \left(\begin{smallmatrix} a & c \\ b & c \end{smallmatrix} \right) := \int_0^\infty dk \frac{\bar{m} \left(\begin{smallmatrix} a & c \\ b & c \end{smallmatrix} \middle| k \right)}{k}, \quad (2.35)$$

$$\bar{\varepsilon}_{ab} := \bar{\varepsilon} \left(\begin{smallmatrix} a & b \\ a & b \end{smallmatrix} \right) = \int_0^\infty dk \frac{\bar{m}(a, b; k)}{k}. \quad (2.36)$$

3. Berechnung der Radialfunktionen $F_L(a, b; k)$

Es scheint nicht möglich zu sein, die Radialfunktionen (2.3), $F_L(a, b; k)$, durch eine der bekannten speziellen Funktionen auszudrücken, indem man sie z.B. als Besseltransformationen der Produkte der Radialfunktionen $g_a(r)$, $f_b(r)$ bzw. $g_b(r)$, $f_a(r)$ auffaßt. Die Schwierigkeit rührt davon her, daß in diesen Produkten die Produkte von jeweils zwei konfluenten hypergeometrischen Funktionen auftreten. Da die Zählerparameter in diesen konfluenten hypergeometrischen Funktionen jedoch nichtpositive ganze Zahlen sind, bilden sie bekanntlich Polynome in r vom Grade n'_a bzw. n'_b , nämlich die Polynomanteile der radialen Wasserstoffwellenfunktionen, so daß ihre Produkte Polynome in r vom Grade $n'_a + n'_b$ bilden. Berücksichtigen wir diese Eigenschaft, so können wir die Integrale (2.3) berechnen.

Dazu benötigen wir erst die Koeffizienten des Produktpolynoms.

Mit den Abkürzungen

$$N_{ab} := -N_a N_b \left[(1+E_a^c)(1+E_b^c) \right]^{1/2} (2\lambda_a)^{j_a-1} (2\lambda_b)^{j_b-1} (W_a + n'_a + j_a)^{-1} \quad (3.1)$$

$$= -N_a N_b \frac{2^{j_a+j_b-2} \lambda_a^{j_a} \lambda_b^{j_b}}{2\alpha \left[(1+E_a^c)(1+E_b^c) \right]^{1/2}} \quad (N_{ab} = N_{ba} !),$$

$$\lambda_{ab} := \lambda_a + \lambda_b \quad (3.2)$$

und (1.22) erhält man:

$$g_a(r) f_b(r) = N_{ab} (W_a + n'_a + j_a) r^{j_a+j_b-2} e^{-\lambda_{ab} r} \sum_{p=0}^{n'_a} \sum_{s=0}^{n'_b} r^{p+s} \frac{(2\lambda_a)^p}{(2j_a+1)_p p!} \frac{(2\lambda_b)^s}{(2j_b+1)_s s!} \times$$

$$\times \left[-n'_a(-n'_a+1)_p + (W_a - x_a)(-n'_a)_p \right] \cdot \left[n'_b(-n'_b+1)_s + (W_b - x_b)(-n'_b)_s \right]. \quad (3.3)$$

Wir wählen jetzt $m=p+s$ und p als neue Summationsvariablen. Da die Mengen $\{0, 1, \dots, n'_a\}$, $\{0, 1, \dots, n'_b\}$ die alten Summationsbereiche sind, folgt daß die Mengen $\{0, 1, \dots, n'_a\} \cup \{0, 1, \dots, n'_b\} = \{0, 1, \dots, n'_a+n'_b\}$ und $\{0, 1, \dots, n'_a\} \cap \{m-n'_b, m-n'_b+1, \dots, m\} = \{\max(0, m-n'_b), \max(0, m-n'_b)+1, \dots, \min(m, n'_a)\} = \{m-\min(m, n'_b), m-\min(m, n'_b)+1, \dots, \min(m, n'_a)\}$ diejenigen der neuen Variablen m und $p=m-s$ sind. Verwenden wir die Beziehungen

$$(-n) \cdot (-n+1)_m = (-n)_m (-n+m)$$

$$\frac{\lambda_a^{n'_a} \lambda_b^s}{\lambda_{ab}^{p+s}} = \left(\frac{W_b}{W_a} \right)^p \frac{1}{\left(1 + \frac{W_b}{W_a} \right)^{p+s}}$$

so ergibt sich:

$$g_a(r) f_b(r) = N_{ab} (W_a + n'_a + j_a) r^{j_a+j_b-2} e^{-\lambda_{ab} r} \sum_{m=0}^{n'_a+n'_b} C_m(a,b) \lambda_{ab}^m r^m \quad (3.4)$$

mit

$$C_m(a,b) = \frac{2^m}{\left(1 + \frac{W_b}{W_a} \right)^m} \sum_{p=m-\min(m, n'_b)}^{\min(m, n'_a)} \frac{(-n'_a)_p (-n'_b)_{m-p} \left(\frac{W_b}{W_a} \right)^p}{(2j_a+1)_p (2j_b+1)_{m-p} p! (m-p)!} \times$$

$$\times \left[-n'_a + p + W_a - x_a \right] \left[n'_b - m + p + W_b - x_b \right]. \quad (3.5)$$

(3.4) wird nun in (2.3) eingesetzt, und die verbleibenden Integrale werden einer Integraltafel [45] entnommen:

$$\int_0^\infty dr r^{\mu-1} e^{-ar} \int_0^\infty dv (b-v) = \frac{\Gamma(\mu+\nu)}{2^\nu \Gamma(\nu+1)} \frac{k^\nu}{a^{\mu+\nu}} {}_2F_1\left(\frac{\mu+\nu}{2}, \frac{\mu+\nu+1}{2}, \nu+1; -\frac{k^2}{a^2}\right). \quad (3.6)$$

Für $F_L(a, b; k)$ erhalten wir dann den Ausdruck

$$F_L(a, b; k) = \frac{N_{ab} (w_a + w'_a + w_b)}{2^{L+\frac{1}{2}} \Gamma(L+\frac{3}{2}) \lambda_{ab}^{h_{ab}+L}} k^{L+\frac{1}{2}} \sum_{m=0}^{n_a+n_b} C_m(a, b) \Gamma(h_{ab}+L+m) \times \\ \times {}_2F_1\left(\frac{1}{2}(h_{ab}+L+m), \frac{1}{2}(h_{ab}+L+m)+\frac{1}{2}, L+\frac{3}{2}; -\frac{k^2}{\lambda_{ab}}\right) \quad (3.7)$$

wobei

$$h_{ab} := j_a + j_b + 1 \quad (3.8)$$

ist.

Wichtig für Abschätzungen ist das asymptotische Verhalten von $F_L(a, b; k)$ für $k \rightarrow 0$ und $k \rightarrow \infty$. Da die Gauss'sche hypergeometrische Funktion ${}_2F_1(a, b, c; -x)$ die Ordnung 1 für kleine Werte von x und die Ordnung $Ax^{-a} + Bx^{-b}$, A, B sind Konstanten, für große Werte von x hat [46], folgt

$$F_L(a, b; k) \sim k^{L+\frac{1}{2}} \quad \text{für } k \rightarrow 0, \\ F_L(a, b; k) \sim k^{-(h_{ab}-\frac{1}{2})} \quad \text{für } k \rightarrow \infty. \quad (3.9)$$

Für die Funktionen (2.29) bekommt man damit unmittelbar

$$m\left(\begin{smallmatrix} a & b \\ c & d \end{smallmatrix} \middle| k\right) \sim \left\{ \begin{array}{ll} k^{L_{\min} + L'_{\min} + 2} & \text{für } \mu > 0 \\ k^{L_{\min} + L'_{\min} + 1} & \text{für } \mu = 0 \end{array} \right\} \quad \text{für } k \rightarrow 0, \\ m\left(\begin{smallmatrix} a & b \\ c & d \end{smallmatrix} \middle| k\right) \sim k^{-(h_{ab} + h_{cd} - 1)} \quad \text{für } k \rightarrow \infty. \quad (3.10)$$

$L_{\min}$ bzw. $L'_{\min}$ ist dabei der nach den Auswahlregeln des Abschnittes 2 minimale mögliche Wert von L bzw. L' , der in (2.29) vorkommt. Im allgemeinen kann man nur sagen, daß $L \geq 0$ bzw. $L' \geq 0$ ist und daß für eine Kernladungszahl $Z \approx 1$ $h_{ab} > 3 - \delta$, $0 < \delta \ll 1$, und für $Z\alpha \approx 1$ $h_{ab} > 1 + \delta'$, $0 < \delta' \ll 1$ ist, so daß man mindestens

$$m \left(\begin{smallmatrix} a & b \\ c & d \end{smallmatrix} \middle| k \right) \sim \begin{cases} k^2 & \text{für } \mu > 0 \\ k & \text{für } \mu = 0 \end{cases} \quad \text{für } k \rightarrow 0, \quad (3.11)$$

$$m \left(\begin{smallmatrix} a & b \\ c & d \end{smallmatrix} \middle| k \right) \sim \begin{cases} k^{-(5-\varepsilon)}, & 0 < \varepsilon \ll 1 \text{ für } Z \approx 1 \\ k^{-(1+\varepsilon')}, & 0 < \varepsilon' \text{ für } Z\alpha \approx 1 \end{cases} \quad \text{für } k \rightarrow \infty$$

hat.

Das asymptotische Verhalten (3.9) wird deutlicher, wenn man die hypergeometrischen Funktionen in (3.7) der quadratischen Transformation [47]

$${}_2F_1 \left(a, a + \frac{1}{2}, c; -x \right) = \frac{1}{(1+x)^a} {}_2F_1 \left(2a, 2c - 2a - 1, c; v \right), \quad (3.12)$$

$$v := \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{1+x^2} \right)$$

unterwirft:

$$F_L(a, b; k) = \frac{N_{ab} (W_a + n'_a + n_a)}{\sqrt{\frac{\pi}{2}} (2L+1)!!} \frac{x_{ab}^{L+\frac{1}{2}}}{\lambda_{ab}^{h_{ab}-\frac{1}{2}}} \frac{1}{(1+x_{ab}^2)^{\frac{1}{2}(h_{ab}+L)}} x \quad (3.13)$$

$$x \sum_{m=0}^{n'_a+n'_b} C_m(a, b) \Gamma(h_{ab}+L+m) \frac{1}{(1+x_{ab}^2)^{\frac{1}{2}m}} {}_2F_1 \left(h_{ab}+L+m, 2L+2-(h_{ab}+L+m), L+\frac{3}{2}; v_{ab} \right).$$

Dabei haben wir die neuen Variablen

$$x_{ab} = \frac{k}{\lambda_{ab}} \quad (3.14)$$

$$v_{ab} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{1+x_{ab}^2} \right) \quad (3.15)$$

eingeführt und die Umformung

$$2^{L+\frac{1}{2}} \Gamma(L+\frac{3}{2}) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} (2L+1)!! , (2L+1)!! = 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \dots \cdot (2L+1)$$

verwendet.

Diese Transformation bietet zwei Vorteile:

1. Da dem Grenzwert $k \rightarrow \infty$ der Grenzwert $v_{ab} \rightarrow \frac{1}{2}$ zugeordnet ist und da i.a. ${}_2F_1(a, b, c; \frac{1}{2}) \neq 0$ ist, steckt die ganze Asymptotik von $F_L(a, b; k)$ in dem Faktor $x_{ab}^{L+\frac{1}{2}} (1+x_{ab}^2)^{-\frac{1}{2}(h_{ab}+L)}$.
2. Durch (3.15) wird das k -Intervall $[0, \infty)$ auf das v_{ab} -Intervall $[0, \frac{1}{2})$ transformiert. Das bedeutet, daß die Reihenentwicklungen (1.22) der transformierten hypergeometrischen Funktionen sehr für alle $k \in [0, \infty)$ gut konvergieren, während ja diejenigen der ursprünglichen nur für $x_{ab} < 1$ konvergieren. Die Form (3.13) ist deshalb zur numerischen Berechnung der Radialfunktionen sehr gut geeignet.

IV. Teil: Numerische Rechnungen

Numerische Rechnungen werden für die am häufigsten vorkommenden Funktionen $\bar{m}(a,b;k)$ für eine Photonenmasse $\mu=0$ durchgeführt. Mit einem Algolprogramm werden die Funktionswerte für verschiedene Zustände berechnet und diese mit einem Plotterprogramm direkt zu Zeichnungen verwertet. Weiterhin werden die Schwellenergien

$$\bar{E}_{ab} = \int_0^\infty dk \frac{\bar{m}(a,b;k)}{k}$$

und die spingemittelten L_2 -Normen

$$\|\bar{M}(a,b)\| = \left[\int_0^\infty dk \bar{m}(a,b;k) \right]^{\frac{1}{2}}$$

mit Hilfe einer Integrationsprozedur berechnet.

1. Erläuterungen zur numerischen Auswertung

Zunächst formen wir die Funktionen $\bar{m}(a,b;k)$ (III.2.33) um, so daß sie für die numerische Behandlung besser handhabbar werden. Dazu führen wir erst die neuen Bezeichnungen

$$W_{Lj}(a,b) := [8\pi(2L+1)]^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1 & L & j \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \langle \frac{1}{2} \ell_a j_a \| Q_j \| \frac{1}{2} \ell_b j_b \rangle \frac{W_a + m_a' + j_a}{(2L+1)!!} \quad (1.1)$$

$$C_{mLj}(a,b) := [W_{Lj}(a,b) C_m(a,b) - W_{Lj}(b,a) C_m(b,a)] \Gamma(h_{ab} + L + m), \quad (1.2)$$

$$K_{ab} := \frac{e^2 N_{ab}^2}{(2j_a+1) \cdot 8\pi \cdot \frac{H}{\lambda} \cdot \lambda_{ab}^{2h_{ab}-1}} \quad (1.3)$$

ein. Für die in (1.1) vorkommenden $3j$ - und $9j$ -Symbole (Siehe (III.2.12), (III.2.13)) findet man in der Literatur explizite algebraische Ausdrücke. Die für die $3j$ -Symbole lauten folgendermaßen [39]:

$$\begin{pmatrix} 1 & L & J \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} = (-1)^L [\lambda(\lambda+1)(\lambda L+1)]^{-\frac{1}{2}} \cdot \begin{cases} (J+1)^{\frac{1}{2}} & \text{für } L=J-1 \\ (2J+1)^{\frac{1}{2}} & \text{für } L=J \\ J^{\frac{1}{2}} & \text{für } L=J+1 \end{cases} \quad (1.4)$$

$$\begin{pmatrix} \ell_a & L & \ell'_b \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{cases} \frac{(-1)^N N!}{(N-\ell_a)!(N-L)!(N-\ell'_b)!} \left[\frac{(\bar{I}-2\ell_a)!(\bar{I}-2L)!(\bar{I}-2\ell'_b)!}{(\bar{I}+1)!} \right]^{\frac{1}{2}} & \text{für } I \text{ gerade} \\ 0 & \text{für } I \text{ ungerade} \end{cases} \quad (1.5)$$

$$\bar{I} := \ell_a + L + \ell'_b, \quad N := \frac{1}{2} \bar{I}.$$

Die für die 9j-Symbole entnehmen wir [48] und rechnen sie für unsere Zwecke auf die Symbole

$$Nj(\lambda_{j_1}, \lambda_{j_2}, J, \ell_1, \ell_2, L) := (-1)^L [\lambda(2J+1)(2L+1)]^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1 & L & J \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \times \\ \times \sqrt{6} \left[(\lambda_{j_1}+1)(\lambda_{j_2}+1)(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)(2L+1) \right]^{\frac{1}{2}} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1 \\ \ell_1 & \ell_2 & L \end{Bmatrix} \quad (1.6)$$

um, wobei $I_1 := (2j_1+2j_2)$ und $I_2 := (2j_1-2j_2)$ ist:

1. $L=J$

	$Nj = \left[\frac{2J+1}{J(J+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \times$
$2l_1=2j_1+1, 2l_2=2j_2+1$	$I_2 \left[(I_1+J+2)(I_1-J+1) \right]^{\frac{1}{2}}$
$2l_1=2j_1+1, 2l_2=2j_2-1$	$(I_1+1) \left[(I_2+J+1)(J-I_2) \right]^{\frac{1}{2}}$
$2l_1=2j_1-1, 2l_2=2j_2+1$	$(I_1+1) \left[(I_2+J)(J-I_2+1) \right]^{\frac{1}{2}}$
$2l_1=2j_1-1, 2l_2=2j_2-1$	$-I_2 \left[(I_1+J+1)(I_1-J) \right]^{\frac{1}{2}}$

2. $L=J+1$

	$Nj = \left[\frac{J}{(J+1)(2J+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \times$
$2l_1=2j_1+1, 2l_2=2j_2+1$	$\left[(I_1+J+2)(I_1+J+3)(I_2+J+1)(J-I_2+1) \right]^{\frac{1}{2}}$
$2l_1=2j_1+1, 2l_2=2j_2-1$	$-\left[(I_1+J+2)(I_1-J)(I_2+J+1)(I_2+J+2) \right]^{\frac{1}{2}}$
$2l_1=2j_1-1, 2l_2=2j_2+1$	$\left[(I_1+J+2)(I_1-J)(J-I_2+1)(J-I_2+2) \right]^{\frac{1}{2}}$
$2l_1=2j_1-1, 2l_2=2j_2-1$	$-\left[(I_1-J-1)(I_1-J)(I_2+J+1)(J-I_2+1) \right]^{\frac{1}{2}}$

3. $L=J-1$

	$NJ = \left[\frac{J+1}{J(2J+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \times$
$2l_1=2j_1+1, 2l_2=2j_2+1$	$- \left[(I_1-J+1)(I_1-J+2)(I_2+J)(J-I_2) \right]^{\frac{1}{2}}$
$2l_1=2j_1+1, 2l_2=2j_2-1$	$- \left[(I_1+J+1)(I_1-J+1)(J-I_2-1)(J-I_2) \right]^{\frac{1}{2}}$
$2l_1=2j_1-1, 2l_2=2j_2+1$	$\left[(I_1+J+1)(I_1-J+1)(I_2+J-1)(I_2+J) \right]^{\frac{1}{2}}$
$2l_1=2j_1-1, 2l_2=2j_2-1$	$\left[(I_1+J)(I_1+J+1)(I_2+J)(J-I_2) \right]^{\frac{1}{2}}$

Mit (1.6) und mit

$$RME(\ell_a, L, \ell'_b) := (-1)^{\ell_a} \frac{1}{(2L+1)!!} \begin{pmatrix} \ell_a & L & \ell'_b \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.8)$$

erhält man:

$$\begin{aligned} W_{LJ}(a, b) &= RME(\ell_a, L, \ell'_b) NJ(2j_a, 2j_b, J, \ell_a, \ell'_b, L) (W_a + n'_a + j_a) , \\ W_{LJ}(b, a) &= RME(\ell'_a, L, \ell_b) NJ(2j_a, 2j_b, J, \ell'_a, \ell_b, L) (W_b + n'_b + j_b) . \end{aligned} \quad (1.9)$$

Für die Konstante K_{ab} bekommt man nach Umformungen und mit $e^2 = 4\pi\alpha$ den Ausdruck

$$\begin{aligned} K_{ab} &= \frac{\alpha (2\alpha)^3 2^{2j_a+2j_b} \Gamma(2j_a+n'_a+1) \Gamma(2j_b+n'_b+1) \left(\frac{W_b}{W_a}\right)^{2j_a}}{4\pi (2j_a+1) n'_a! n'_b! [\Gamma(2j_a+1) \Gamma(2j_b+1)]^2 (1+E_a^0)(1+E_b^0)} \times \\ &\times \frac{1}{(W_a-x_a)(W_b-x_b) W_a^4 W_b^3 \left(1+\frac{W_b}{W_a}\right)^{2j_a+2j_b+1}} . \end{aligned} \quad (1.10)$$

Die Funktion $\bar{m}(a, b; k)$ läßt sich mit diesen Bezeichnungen in der Form

$$\begin{aligned} \bar{m}(a, b; k) &= \\ &= K_{ab} \frac{x_{ab}}{(1+x_{ab}^2)^{k_{ab}}} \sum_J \sum_{L, L'} \cos \frac{\pi}{2} (L-L') \left[\frac{x_{ab}}{(1+x_{ab}^2)^{\frac{1}{2}}} \right]^{L+L'} \zeta_{LJ}^1(a, b; x_{ab}) \zeta_{L'L'}^1(a, b; x_{ab}) \end{aligned} \quad (1.11)$$

schreiben. Dabei ist

$$G'_{LJ}(a, b; x_{ab}) =$$

$$\sum_{m=c}^{n_a+n_b} C_{mLJ}(a, b) (1+x_{ab}^2)^{-\frac{1}{2}m} {}_2F_1\left(\ell_{ab}+L+m, \ell_{ab}-L-m; L+\frac{3}{2}; x_{ab}\right). \quad (1.12)$$

Die Auswahlregeln von III.2. legen die Summationsgrenzen in (1.11) folgendermaßen fest:

$$J_i := \max(1, |j_a - j_b|), \quad J_f := j_a + j_b,$$

$$L_i := \begin{cases} J_i - 1 & \text{für } l_a + l_b + J_i \text{ gerade} \\ J_i & \text{für } l_a + l_b + J_i \text{ ungerade} \end{cases}, \quad (1.13)$$

$$L_f := \begin{cases} J_f & \text{für } l_a + l_b + J_f \text{ ungerade} \\ J_f + 1 & \text{für } l_a + l_b + J_f \text{ gerade} \end{cases} = \begin{cases} J_f & \text{für } L_i + J_f \text{ gerade} \\ J_f + 1 & \text{für } L_i + J_f \text{ ungerade} \end{cases}$$

Ebenfalls aus den Auswahlregeln folgt, daß die L, L' -Summe in (1.11) nur aus den Termen

$$\begin{cases} \left[\frac{x_{ab}}{(1+x_{ab}^2)^{1/2}} \right]^{2(J-1)} \left[G'_{J-1J}(a, b; x_{ab}) - \frac{x_{ab}^L}{1+x_{ab}^2} G'_{J+1J}(a, b; x_{ab}) \right]^2 & \text{für } J+l_a+l_b \text{ gerade} \\ \left[\frac{x_{ab}}{(1+x_{ab}^2)^{1/2}} \right]^{2J} \left[G'_{JJ}(a, b; x_{ab}) \right]^2 & \text{für } J+l_a+l_b \text{ ungerade} \end{cases} \quad (1.14)$$

besteht. Durch geeignetes Zusammenfassen dieser Summanden der J -Summe kann man in $\bar{m}(a, b; k)$ auch eine L -Summe schreiben:

$$\begin{aligned} \bar{m}(a, b; k) = & K_{ab} \frac{x_{ab}}{(1+x_{ab}^2)^{1/2}} \left\{ \sum_{L \in \{L_i, L_i+2, \dots, L_f-2\}} \left(\frac{x_{ab}^L}{1+x_{ab}^2} \right)^L \times \right. \\ & \times \left[\left(G'_{LL}(a, b; x_{ab}) \right)^2 + \left(G'_{LL+1}(a, b; x_{ab}) - \frac{x_{ab}^L}{1+x_{ab}^2} G'_{L+2, L+1}(a, b; x_{ab}) \right)^2 \right] + \\ & \left. + \left(\frac{x_{ab}^L}{1+x_{ab}^2} \right)^{L_f} \left(G'_{L_f L_f}(a, b; x_{ab}) \right)^2 \right\} \end{aligned} \quad (1.15)$$

Wir bemerken noch, daß in diesem Ausdruck wegen den Auswahlregeln $G'_{L_1 L_1}(a, b; x_{ab}) = 0$ im Falle $L_1 = J_1 - 1$ und $G'_{L_f L_f}(a, b; x_{ab}) = 0$ im Falle $L_f = J_f + 1$ ist.

Für die praktische Berechnung von (1.15) definieren wir bei fest vorgegebenen Quantenzahlen a, b der Einfachheit halber die Funktion

$$F(x) := \frac{\overline{m}(a, b; k)}{K_{ab} \cdot x} \quad , \quad X = x_{ab} \quad , \quad k = \lambda_{ab} x_{ab} \quad , \quad (1.16)$$

die im Plotterprogramm auch als Funktionsprozedur verwendet wurde. Da die numerische Integration bei endlichen Integrationsgrenzen einfacher ist als die bei unendlichen, führen wir die Integrale $\overline{\varepsilon}_{ab}$, $\|\overline{M}(a, b)\|^2$ gemäß $\int_0^\infty dx f(x) = \int_0^1 dx f(x) + \int_1^\infty dx f(x) = \int_0^1 dx f(x) + \int_0^1 dx x^{-2} f(x^{-1})$ auf je eine Summe von zwei Integralen über das endliche Intervall $[0, 1]$ zurück:

$$\int_0^\infty dk \frac{\overline{m}(a, b; k)}{k} = K_{ab} \left[\int_0^1 dx F(x) + \int_0^1 dx \frac{1}{x^2} F\left(\frac{1}{x}\right) \right] \quad , \quad (1.17)$$

$$\int_0^\infty dk \overline{m}(a, b; k) = \lambda_{ab} K_{ab} \left[\int_0^1 dx x F(x) + \int_0^1 dx \frac{1}{x^3} F\left(\frac{1}{x}\right) \right] \quad , \quad (1.18)$$

Es ist daher günstig im Integrationsprogramm die Funktionsprozedur

$$F(I, x) := \begin{cases} F(x) & \text{für } I = 0 \\ \frac{1}{x^3} F\left(\frac{1}{x}\right) & \text{sonst} \end{cases} \quad (1.19)$$

einzuführen, mit der sich dann die Integrale in der symmetrischen Form

$$\overline{\varepsilon}_{ab} = K_{ab} \left[\int_0^1 dx F(0, x) + \int_0^1 dx x F(1, x) \right] \quad , \quad (1.20)$$

$$\|\overline{M}(a, b)\|^2 = \lambda_{ab} K_{ab} \left[\int_0^1 dx x F(0, x) + \int_0^1 dx F(1, x) \right] \quad (1.21)$$

schreiben. Man erkennt in (1.15), daß in $F(x)$ nur die Ausdrücke

$1/(1+x^2)$ und $x^2/(1+x^2)$ der Variablen x , die bei der Transformation $x \rightarrow 1/x$ ineinander übergehen, vorkommen. Definieren wir also

$$x_r := \begin{cases} \frac{1}{1+x^2} & \text{für } I=0 \\ \frac{x^2}{1+x^2} & \text{sonst} \end{cases}, \quad x_s := \begin{cases} \frac{x^2}{1+x^2} & \text{für } I=0 \\ \frac{1}{1+x^2} & \text{sonst} \end{cases} \quad (1.22)$$

als neue Variablen und fassen $F(x)$ als Funktion dieser Variablen auf, so erhält man (1.19) in der Form

$$F(0, x) = x_r^{h_{ab}} \{x_r, x_s\}, \quad (1.23)$$

$$F(1, x) = x^{2h_{ab}-3} x_s^{h_{ab}} \{x_r, x_s\},$$

wobei die geschweifte Klammer diejenige von (1.15) in den Variablen x_r, x_s ist. Da sämtliche Integranden von (1.20), (1.21) für $2h_{ab}-3 \geq 0$, d.h. i.a. für $Z \leq 118$, regulär sind, lassen sich die Integrale in diesem Z -Bereich bequem numerisch berechnen.

Bei der praktischen Durchführung der Berechnung von (1.15) benutzten wir für die hypergeometrischen Funktionen in (1.12) zunächst die Bibliotheksprozedur HYGE. Es stellte sich jedoch heraus, daß man Rechenzeit spart, wenn man die hypergeometrischen Funktionen, die mit $a=h_{ab}+L$, $b=2+L-h_{ab}$, $c=L+1.5$ und mit $a+m+b-m+1=2c$ die Gestalt ${}_2F_1(a+m, b-m, c; v)$ haben, rekursiv über die Beziehungen

$${}_2F_1(a+m, b-m, c; v) = \frac{1+a-b+2m}{c-b+m-1} (1-v) {}_2F_1(a+m, b-(m-1), c; v) +$$

$$+ \frac{c-a-m}{c-b+m-1} {}_2F_1(a+(m-1), b-(m-1), c; v) = \quad (1.24)$$

$$= 2(1-v) {}_2F_1(a+m, b-(m-1), c; v) + {}_2F_1(a+(m-1), b-(m-1), c; v)$$

$$\begin{aligned}
 {}_2F_1(a+m+1, b-m, c; v) &= \\
 &= \frac{b-m}{a+m} \left[{}_2F_1(a+m, b-(m-1), c; v) - {}_2F_1(a+m, b-m, c; v) \right] + \\
 &\quad + {}_2F_1(a+m, b-m, c; v)
 \end{aligned} \tag{1.25}$$

die man aus den Kontingenzrelationen für die Gauss'sche hypergeometrische Funktion [49] herleiten kann, berechnet. Die Anfangswerte der Rekursion,

$${}_2F_1(a+1, b, c; v) \text{ und } {}_2F_1(a, b, c; v), \tag{1.26}$$

werden zusammen in einer Laufanweisung direkt über die Reihendarstellungen berechnet, wobei die numerische Aufsummation beendet wird, sobald der relative Fehler kleiner als eine vorgegebene Zahl EPS wird.

2. Das Algolprogramm

Wir geben hier nur das Protokoll des Integrationsprogrammes wieder, denn die Berechnung von $\bar{m}(a,b;k)$ erfolgt im Plotterprogramm, das wegen den graphischen Anweisungen natürlich umfangreicher ist, im wesentlichen auf dieselbe Weise. Zunächst machen wir eine Liste der im Programm verwendeten Variablen, Felder und Prozeduren und deren Zuordnung zu den schon eingeführten Bezeichnungen.

Variablen:

PI = $\pi = 3.141\ 592\ 653\ 6$,	ALP = $\alpha = 1/137.03602$,
ME = $m_e = 5.110\ 41 \cdot 10^5\ \text{eVc}^{-2}$,	HQ = $\hbar = 6.582\ 183 \cdot 10^{-16}\ \text{eVsec}$,
Z = Z	ZE = $Z\alpha$

NA = n_a	NB = n_b
NSA = n'_a	NSB = n'_b
JJA = $2j_a$	JJB = $2j_b$
LA = l_a	LB = l_b
LSA = l'_a	LSB = l'_b
KA = χ_a	KB = χ_b
GA = γ_a	GB = γ_b
WA = w_a	WB = w_b
AL = λ_a	BL = λ_b
EA = E_a^0	EB = E_b^0
DA = $w_a - \chi_a$	DB = $w_b - \chi_b$
AG = $2j_a + 1$	BG = $2j_b + 1$
A = $w_a + n'_a + \gamma_a$	B = $w_b + n'_b + \gamma_b$
QA = w_a / w_b	QB = w_b / w_a

$$LAB = \lambda_{ab}$$

$$H = h_{ab}$$

$$DE = |E_a^0 - E_b^0|$$

$$NS = n'_a + n'_b$$

$$K1 = K_{ab}$$

$$K2 = K_{ab}/\lambda_{ab}$$

$$I1 = \bar{\epsilon}_{ab}$$

$$I2 = \|M(a,b)\|$$

$$L = L$$

$$LI = L_i$$

$$LF = L_f$$

$$J = J-L$$

$$JI = J_i$$

$$JF = J_f$$

$$DI = J_1 - L_i$$

$$DF = J_f - L_f$$

$$M = m$$

Weitere Variablen kommen in den Prozeduren vor und werden dort erklärt. Außerdem wurden im Programm einige hier nicht näher spezifizierte Hilfsvariablen benutzt.

Felder:

$$FAK[N] = N!$$

$$R[P] = h_{ab} + P$$

$$Q[P] = \Gamma(h_{ab} + P)$$

$$O[P-NS] = 2 + P - NS - h_{ab}$$

$$WAB[L, J] = W_{LJ+L}(a, b)$$

$$WBA[L, J] = W_{LJ+L}(b, a)$$

$$HI[L, M] = (2 + L - M - h_{ab}) / (L + M + h_{ab})$$

$$C[M, L, J] = C_{mLJ+L}$$

$$G[L, J] = G'_{LJ+L}(a, b; x_{ab})$$

Prozeduren: (Die mit * versehenen sind aus der Programmbibliothek der TR 440)

$$FF(N) = N!!$$

$$* \text{GERADE}(N)$$

$$* \text{GAM}(X) = \Gamma(X)$$

$$KLA(X, P) = (X)_P$$

$$* \text{HYGE}(A, B, C, X, EPS, IR, N, F, OK) , \quad F = {}_2F_1(A, B, C; X)$$

$$NJ(JJ1, JJ2, J, L1, L2, L) = NJ(2j_1, 2j_2, J, l_1, l_2, L)$$

$$RME(L1, L, L2) = RME(l_1, L, l_2)$$

*EXTINT(EP,A,B,X,F,IN,ER,MU)

$IN = \int_A^B dx F(x)$ EP = vorgegebener relativer Fehler

ER = relativer Fehler und MU = Sprungmarke bei irregulärem

Abbruch der Integration

$F(I,X) = (1.19)$

$X = x$ $XX = x^2$ $XR = x_r$

$XS = x_s$ $U = \sqrt{x_r}$ $UP = 1+U$

$V = (1-U)$

$A = R[L]$ $B = O[L]$ $D = L+1.5$

$FU = {}_2F_1(A,B,D;V)$ $FO = {}_2F_1(A+1,B,D;V)$

EPS = vorgegebener relativer Fehler für die Berechnung
von FU und FO (globale Variable!)

$FU = {}_2F_1(A+M,B-M,D;V)$ $FO = {}_2F_1(A+M+1,B-M,D;V)$

Hilfsvariablen: KI, KF, P, Y, Z, S, T

HUEBERSETZE,NUM.=(1,1) ,
 QUELLE=/FREMSTRING

START PS&ALGOLCOMP (34.02)
 MD STDHP WURDE ERZEUGT

ANFANG PROTOKOLL

```

000001
000002 'BEGIN'
000003 'INTEGER'NA,NSA,JJA,LA,LSA,MA ;
000004 'INTEGER'NB,NSB,JJB,LB,LSB,MB ;
000005 'INTEGER'Z,IR ;
000006 'REAL'K,X,RE,EP,EPS ;
000007 'REAL'IN,ER ;
000008 'REAL'ZE,DE,ME,LAB,HQ ;
000009 'INTEGER'KA,KB,NS,JI,JF,LI,LF,LJM ;
000010 'REAL'GA,GB,WA,WB,EA,EB,AL,BL,DA,DB,QA,QB,A,B,AG,BG,H ;
000011 'REAL'K1,K2,PI,ALP,W,MY,D,I1,I2,SUM,SAM ;
000012 'INTEGER'N,NN,NNA,NNB,SZ,D1,DF ;
000013
000014
000015
000016
000017
000018 'INTEGER' 'PROCEDURE'FF(N) ;
000019 'VALUE'N ;
000020 'INTEGER'N ;
000021 'BEGIN'
000022 FF:= 'IF' N<1 'THEN' 1 'ELSE' N*FF(N-2) ;
000023 'END' ;
000024
000025 'BOOLEAN' 'PROCEDURE'GERADE(N);
000026 'VALUE'N; 'INTEGER'N; 'CODE';
000027
000028 'REAL' 'PROCEDURE'GAM(X) ;
000029 'VALUE'X ; 'REAL'X ; 'CODE' ;
000030
000031 'REAL' 'PROCEDURE'KLA(X,P) ;
000032 'VALUE'X,P ; 'INTEGER'P ; 'REAL'X ;
000033 'BEGIN'
000034 'REAL'A ;
000035 'INTEGER'N ;
000036 A:=1 ;
000037 'FOR' N:=0 'STEP' 1 'UNTIL' P-1 'DO'
000038 A:=A*(X+N) ;
000039 KLA:=A ;
000040 'END' ;
000041
000042 'PROCEDURE'HYGE(A,B,C,X,EP,IR,N,F,OK) ;
000043 'VALUE'A,B,C,X,EP ;
000044 'REAL'A,B,C,X,EP,F ; 'INTEGER'IR,N,OK ;
000045 'CODE';
000046
000047

```

```

000048 'REAL' 'PROCEDURE' NJ(JJ1,JJ2,J,L1,L2,L) ;
000049 'VALUE' JJ1,JJ2,J,L1,L2,L ;
000050 'INTEGER' JJ1,JJ2,J,L1,L2,L ;
000051 'BEGIN' 'INTEGER' I,I1,I2,I3,I4 ;
000052 I:=J+J ;
000053 I1:=0.5*(JJ1+JJ2) ;
000054 I2:=0.5*(JJ1-JJ2) ;
000055 I3:=L1+L1 ;
000056 I4:=L2+L2 ;
000057 'IF' L=J 'THEN'
000058 'BEGIN'
000059 'REAL' N ;
000060 N:=(I+1)/(J*(J+1)) ;
000061 'IF' I3=JJ1+1 'AND' I4=JJ2+1 'THEN'
000062 NJ:=I2*SQRT((I1+J+2)*(I1-J+1)*N)
000063 'ELSE' 'IF' I3=JJ1+1 'AND' I4=JJ2-1 'THEN'
000064 NJ:=(I1+1)*SQRT((I2+J+1)*(J-I2)*N)
000065 'ELSE' 'IF' I3=JJ1-1 'AND' I4=JJ2+1 'THEN'
000066 NJ:=(I1+1)*SQRT((I2+J)*(J+1-I2)*N)
000067 'ELSE' 'IF' I3=JJ1-1 'AND' I4=JJ2-1 'THEN'
000068 NJ:=-I2*SQRT((I1+J+1)*(I1-J)*N)
000069 'ELSE' 'GOTO' MA1;
000070 'GOTO' MA2
000071 'END' 'ELSE'
000072 'IF' L=J+1 'THEN'
000073 'BEGIN'
000074 'REAL' N ;
000075 N:=J/((J+1)*(I+1)) ;
000076 'IF' I3=JJ1+1 'AND' I4=JJ2+1 'THEN'
000077 NJ:=SQRT((I1+J+2)*(I1+J+3)*(I2+J+1)*(J+1-I2)*N)
000078 'ELSE' 'IF' I3=JJ1+1 'AND' I4=JJ2-1 'THEN'
000079 NJ:=-SQRT((I1+J+2)*(I1-J)*(I2+J+1)*(I2+J+2)*N)
000080 'ELSE' 'IF' I3=JJ1-1 'AND' I4=JJ2+1 'THEN'
000081 NJ:=SQRT((I1+J+2)*(I1-J)*(J+1-I2)*(J+2-I2)*N)
000082 'ELSE' 'IF' I3=JJ1-1 'AND' I4=JJ2-1 'THEN'
000083 NJ:=-SQRT((I1-J-1)*(I1-J)*(I2+J+1)*(J+1-I2)*N)
000084 'ELSE' 'GOTO' MA1;
000085 'GOTO' MA2
000086 'END' 'ELSE'
000087 'IF' L=J-1 'THEN'
000088 'BEGIN'
000089 'REAL' N ;
000090 N:=(J+1)/(J*(I+1)) ;
000091 'IF' I3=JJ1+1 'AND' I4=JJ2+1 'THEN'
000092 NJ:=-SQRT((I1-J+1)*(I1-J+2)*(I2+J)*(J-I2)*N)
000093 'ELSE' 'IF' I3=JJ1+1 'AND' I4=JJ2-1 'THEN'
000094 NJ:=-SQRT((I1+J+1)*(I1-J+1)*(J-1-I2)*(J-I2)*N)
000095 'ELSE' 'IF' I3=JJ1-1 'AND' I4=JJ2+1 'THEN'
000096 NJ:=SQRT((I1+J+1)*(I1-J+1)*(I2+J-1)*(I2+J)*N)
000097 'ELSE' 'IF' I3=JJ1-1 'AND' I4=JJ2-1 'THEN'
000098 NJ:=SQRT((I1+J)*(I1+J+1)*(I2+J)*(J-I2)*N)
000099 'ELSE' 'GOTO' MA1;
000100 'GOTO' MA2
000101 'END' 'ELSE'
000102 'BEGIN'
000103 NJ:=0 ;
000104 'GOTO' MA1
000105 'END' ;
000106 MA1:
000107 OUTPUT(6,('/'('AUSWAHLREGELN IN NJ NICHT BEACHTET ')))
000108 MA2:
000109 'END';

```

```

000110
000111 'PROCEDURE'EXTINT(EPS,A,B,X,F,INTEGRAL,ERROR,FAIL) ;
000112 'VALUE'EPS,A,B ;
000113 'REAL'EPS,A,B,X,F,INTEGRAL,ERROR ;
000114 'LABEL'FAIL ;
000115 'CODE' ;
000116
000117
000118
000119
000120 PI:=3.1415926536 ;
000121 ALP:=1/137.03602 ;
000122 ME:=5.11041'5 ;
000123 HQ:=6.582183'-16 ;
000124 MY:=0 ;
000125 IR:=0 ;
000126 RE:=1'-2 ;
000127 NNA:=10 ;
000128 NNB:=10 ;
000129 NN:=2*(NNA+NNB) ;
000130
000131
000132
000133 'BEGIN'
000134 'ARRAY'FAKCO:NN] ;
000135
000136 'REAL' 'PROCEDURE'RME(L1,L2) ;
000137 'VALUE'L1,L2,L ; 'INTEGER'L1,L2,L ;
000138 'BEGIN' 'INTEGER'I,N ;
000139 I:=L1+L+L2 ; N:=0.5*I ;
000140 'IF' GERADE(I)'EQUIV''FALSE' 'THEN' RME:=0 'ELSE'
000141 'IF' L<ABS(L1-L2) 'OR' L>L1+L2 'THEN' RME:=0 'ELSE'
000142 'BEGIN' 'INTEGER'V ;
000143 'IF' GERADE(N+L1)'EQUIV''TRUE' 'THEN' V:=1 'ELSE' V:=-1
000144 RME:=V*FAK[N]/(FAK[N-L1]*FAK[N-L]*FAK[N-L2]*FF(L+L+1))*
000145 SQRT(FAK[I-L2-L2]*FAK[I-L-L]*FAK[I-L1-L1]/FAK[I+1]) ;
000146 'END' ;
000147 'END' ;
000148
000149 FAKCO:=1 ;
000150 'FOR' N:=1 'STEP' 1 'UNTIL' NN 'DO'
000151 FAK[N]:=N*FAK[N-1] ;
000152
000153 NN:=0 ;
000154 EP:=1'-8 ;
000155 EPS:=1'-12 ;
000156
000157
000158
000159 'FOR' Z:=1 'DO'
000160 'BEGIN'
000161 SUM:=0 ;
000162 SAM:=0 ;
000163 SZ:=28 ;
000164
000165
000166 'FOR' NA:=2 'DO'
000167 'FOR' NSA:=NA-1 'DO'
000168 'FOR' LA:=1 'DO'
000169 'FOR' NB:=1 'STEP' 1 'UNTIL' NNB 'DO'
000170 'FOR' NSB:=NB-1 'STEP' -1 'UNTIL' 0 'DO'
000171 'FOR' LB:=NB-NSB-1,NB-NSB 'DO'

```

```

000172 'BEGIN'
000173 'IF' LA=NA 'OR' LB=NB 'THEN' 'GOTO' MD ;
000174 JJA:=2*(NA-NSA)-1 ;
000175 JJB:=2*(NB-NSB)-1 ;
000176 LSA:=JJA-LA ;
000177 LSB:=JJB-LB ;
000178 KA:= 'IF' LA=NA-NSA 'THEN' LA 'ELSE' -(LA+1) ;
000179 KB:= 'IF' LB=NB-NSB 'THEN' LB 'ELSE' -(LB+1) ;
000180 NS:=NSA+NSB ;
000181 JI:= 'IF' JJA=JJB 'THEN' 1 'ELSE' 0.5*ABS(JJA-JJB) ;
000182 JF:= 0.5*(JJA+JJB) ;
000183 LI:= 'IF' GERADE(JI+LA+LB) 'EQUIV' 'TRUE' 'THEN' JI-1 'ELSE' JI ;
000184 LF:= 'IF' GERADE(LI+JF) 'EQUIV' 'TRUE' 'THEN' JF 'ELSE' JF+1 ;
000185 DI:=JI-LI ;
000186 DF:=JF-LF ;
000187 MA:=0 ;
000188 MB:=0 ;
000189
000190
000191 ZE:=Z*ALP ;
000192 GA:=SQRT(KA*KA-ZE*ZE) ;
000193 GB:=SQRT(KB*KB-ZE*ZE) ;
000194 WA:=NSA*NSA+2*NSA*GA+KA*KA ;
000195 WB:=NSB*NSB+2*NSB*GB+KB*KB ;
000196 A:=ZE*ZE/WA ;
000197 B:=ZE*ZE/WB ;
000198 DE:=ABS(0.5*(A-B)+0.125*(A*A-B*B)) ;
000199 WA:=SQRT(WA) ;
000200 WB:=SQRT(WB) ;
000201 AL:=ZE/WA ;
000202 BL:=ZE/WB ;
000203 LAB:=AL+BL ;
000204 EA:=(NSA+GA)/WA ;
000205 EB:=(NSB+GB)/WB ;
000206 DA:=WA-KA ;
000207 DB:=WB-KB ;
000208 QA:=WA/WB ;
000209 QB:=WB/WA ;
000210 AG:=GA+GA+1 ;
000211 BG:=GB+GB+1 ;
000212 A:=WA+NSA+GA ;
000213 B:=WB+NSB+GB ;
000214 H:=GA+GB+1 ;
000215 K2:=ALP*ZE**2*2***(AG+BG)*GAM(AG+NSA)*GAM(BG+NSB)*QB***(AG+1)
    (16*PI*GAM(AG)**2*GAM(BG)**2*(JJA+1)*FAK(ISA)*FAK(NSB)
    DA*DB*WA**4*WB*WB*(1+QB)**(AG+BG)*(1+EA)*(1+EB)) ;
000216 K1:=K2*LAB ;
000217
000218
000219
000220
000221 'BEGIN'
000222 'INTEGER' P ;
000223 'ARRAY' WAB[LI:LF,-1:+1],WBA[LI:LF,-1:+1],CCO:NS,LI:LF,-1:+1 ;
000224 'ARRAY' RLI:LF+NS],Q[LI:LF+NS],Q[LI-NS:LF] ;
000225 'ARRAY' H[LI:LF,0:NS] ;
000226
000227
000228
000229
000230 'REAL' 'PROCEDURE' F(I,X) ;
000231 'VALUE' I,X ;
000232 'INTEGER' I ;
000233 'REAL' X ;

```

```

000234 'BEGIN'
000235   'REAL' XX, XR, XS, U, UP, UM, V, S, T ;
000236   'ARRAY' GCL1: LF, =1: +1] ;
000237   W:=1 ;
000238   XX:=X*X ;
000239   XR:= 'IF' I=0 'THEN' 1/(1+XX) 'ELSE' XX/(1+XX) ;
000240   XS:= 'IF' I=0 'THEN' XX/(1+XX) 'ELSE' 1/(1+XX) ;
000241   U:=SQRT(XR) ;
000242   UP:=1+U ;
000243   V:=0.5*(1-U) ;
000244   'FOR' L:=LI 'STEP' 2 'UNTIL' LF 'DO'
000245   'BEGIN'
000246     'REAL' FU, FD, A, B, D ;
000247     'INTEGER' P, KI, KF ;
000248     KI:= 'IF' L=LI 'THEN' DI 'ELSE' -1 ;
000249     KF:= 'IF' L=LF 'THEN' DF 'ELSE' +1 ;
000250     A:=RCL] ;
000251     B:=OCL] ;
000252     D:=L+1.5 ;
000253     FU:=1 ;
000254     FD:=1 ;
000255     S:=1 ; T:=1 ;
000256     P:=-1 ;
000257     'FOR' P:=P+1 'WHILE' ABS(T/FD)>EPS 'DO'
000258     'BEGIN'
000259       'REAL' Y, Z ;
000260       Y:=(B+P)/((D+P)*(1+P))*V ;
000261       Z:=(A+P)*Y ;
000262       S:=S*Z ;
000263       Z:=Z+Y ;
000264       T:=I*Z ;
000265       FU:=FU+S ;
000266       FD:=FD+T ;
000267     'END' ;
000268     GCL, -1]:=CCL, L, -1]*FU ;
000269     GCL, 0]:=CCL, L, 0]*FU ;
000270     GCL, +1]:=CCL, L, +1]*FU ;
000271     S:=1 ;
000272     'FOR' M:=1 'STEP' 1 'UNTIL' NS 'DO'
000273     'BEGIN'
000274       FU:=UP*FD-FU ;
000275       FD:=HICL, M]*(FD-FU)+FU ;
000276       S:=U*S ;
000277       T:=S*FU ;
000278       'FOR' J:=KI 'STEP' 1 'UNTIL' KF 'DO'
000279       GCL, J]:=GCL, J]+CCL, L, J]*T ;
000280     'END' ;
000281   'END' ;
000282   S:=0 ;
000283   'FOR' L:=LI 'STEP' 2 'UNTIL' LF-2 'DO'
000284   'BEGIN'
000285     T:= 'IF' L=0 'THEN' 1 'ELSE' XS**L ;
000286     S:=S+T*(GCL, 0]**2+(GCL, +1]-XS*GCL+2, -1]**2) ;
000287   'END' ;
000288   T:= 'IF' LF=0 'THEN' 1 'ELSE' XS**LF ;
000289   S:=S+T*GCL, 0]**2 ;
000290   F:= 'IF' I=0 'THEN' W*XR**H*S 'ELSE'
000291     W*X**((H+H-3)*XS**H*S ;
000292 'END' ;
000293
000294
000295

```

```

000296
000297 'FOR' L:=LI 'STEP' 2 'UNTIL' LF 'DO'
000298 'BEGIN'
000299 'REAL'S,T ;
000300 S:=RME(LA,L,LSB) ;
000301 T:=RME(LSA,L,LS) ;
000302 'FOR' J:=-1,0,+1 'DO'
000303 'BEGIN'
000304 WAB(L,J):= 'IF' (L+J)<JI 'OR' (L+J)>JF 'OR' S=0 'THEN' 0
000305 'ELSE'
000306 S*NJ(JJA,JJB,L+J,LA,LSB,L)*A ;
000307 WBA(L,J):= 'IF' (L+J)<JI 'OR' (L+J)>JF 'OR' T=0 'THEN' 0
000308 'ELSE'
000309 T*NJ(JJA,JJB,L+J,LSA,LS,L)*B ;
000310 'END' ;
000311 'END' ;
000312
000313 RELI:=H+LI ;
000314 QCLI:=GAM(H+LI) ;
000315 QCLI-NSJ:=LI-NS+2-H ;
000316 'FOR' P:=LI+1 'STEP' 1 'UNTIL' LF+NS 'DO'
000317 'BEGIN'
000318 RCP:=P+H ;
000319 QCP:=(H+P-1)*Q[P-1] ;
000320 QCP-NSJ:=P-NS+2-H ;
000321 'END' ;
000322
000323 'FOR' M:=0 'STEP' 1 'UNTIL' NS 'DO'
000324 'BEGIN'
000325 'REAL'S,T ;
000326 'INTEGER'U,N ;
000327 S:=0 ;
000328 T:=0 ;
000329 'IF' M>NSB 'THEN' U:=NSB 'ELSE' U:=M ;
000330 'IF' M>NSA 'THEN' N:=NSA 'ELSE' N:=M ;
000331 'FOR' P:=M-U 'STEP' 1 'UNTIL' N 'DO'
000332 'BEGIN'
000333 'INTEGER'Q ;
000334 Q:=P+U-N ;
000335 S:=S+KLA(-NSA,P)*KLA(-NSB,M-P)*QB**P/
000336 (FAKCP)*FAK[M-P]*KLA(AG,P)*KLA(BG,M-P))*
000337 (-NSA+P+DA)*(NSB+P-M+DB) ;
000338 T:=T+KLA(-NSB,Q)*KLA(-NSA,M-Q)*QA**Q/
000339 (FAKQ)*FAK[M-Q]*KLA(BG,Q)*KLA(AG,M-Q))*
000340 (-NSB+Q+DB)*(NSA+Q-M+DA) ;
000341 'END' ;
000342 S:=S*2**M/(1+QB)**M ;
000343 T:=T*2**M/(1+QA)**M ;
000344 'FOR' L:=LI 'STEP' 2 'UNTIL' LF 'DO'
000345 'BEGIN'
000346 HI(L,M):=QCL-M]/RCL+M] ;
000347 'FOR' J:=-1,0,+1 'DO'
000348 C[M,L,J]:=(S*WAB(L,J)-T*WBA(L,J))*Q[M+L] ;
000349 'END' ;
000350 'END' ;
000351
000352
000353 SZ:=SZ+1 ;
000354 'IF' SZ=29 'THEN'
000355 'BEGIN'
000356 OUTPUT(6,('(*4/128)(' (NA,LA,JA)=')'4B(' (NB,LB,JB)=')')') ;
000357 OUTPUT(6,('(*4B('EPS(A,B)=')')')') ;

```

```

000358 OUTPUT(6,'('10B'(INORM(M(A,B))='))') ;
000359 SZ:=1 ;
000360 'END' ;
000361S OUTPUT(6,'('1//12B'('('1)')3(ZD),'('1/2)')5B'('('1)')3(ZD),
000362S '('1/2)')')')',NA,LA,JA,NB,LB,JB) ;
000363 N:=TIME ;
000364 I1:=0 ;
000365 I2:=0 ;
000366
000367 'BEGIN'
000368 EXTINT(EP,0,1,X,F(0,X),IN,ER,MU) ;
000369 I1:=IN ;
000370 EXTINT(EP,0,1,X,X*F(1,X),IN,ER,MU) ;
000371 I1:=I1+IN ;
000372 EXTINT(EP,0,1,X,F(1,X),IN,ER,MU) ;
000373 I2:=IN ;
000374 EXTINT(EP,0,1,X,X*F(0,X),IN,ER,MU) ;
000375 I2:=I2+IN ;
000376 'END' ;
000377 'GOTO' MI ;
000378 MU:
000379 OUTPUT(6,'('1/12B'('IABBRUCH DER INTEGRATION','))') ;
000380 OUTPUT(6,'('('1 RELATIVER FEHLER = ')',-D.5D'+ZD')',ER) ;
000381 OUTPUT(6,'('1/12B'('LEZTE INTEGRATIONSWERTIE:')' 5B')') ;
000382 MI:
000383
000384 I1:=I1*K1 ;
000385 I2:=SQRT(I2*K1*LAB) ;
000386 OUTPUT(6,'('15B,2(-D.5D'+ZD/B)')',I1,I2) ;
000387 M:=TIME ;
000388 A:=(N-NN)*1'-5 ;
000389 B:=(M-N)*1'-5 ;
000390 NN:=M ;
000391 OUTPUT(6,'('10B,2(ZD,4D3B)')',A,B) ;
000392
000393
000394 'END' ;
000395
000396 SUM:=SUM+I1 ;
000397 SAM:=SAM+I2 ;
000398 MD:
000399 'END' ;
000400
000401 PAGE ;
000402 NEWLINE ;
000403 PRINT(SUM) ;
000404 NEWLINE ;
000405 PRINT(SAM) ;
000406 ENDE:
000407 PAGE ;
000408
000409 'END' ;
000410 'END' ;
000411 'END' ;
000412
000413
000414
000415
000416
000417
ENDE PROTOKOLL

```

3. Tabelle und Zeichnungen

Die Tabelle enthält die Zahlenwerte der Schwellenergien $\text{EPS}(A,B) = \bar{\epsilon}_{ab}$ und der Normen $\text{NORM}(M(A,B)) = \|\overline{M(a,b)}\|$ für alle möglichen Übergänge $1S_{1/2} - 1S_{1/2}$ bis $3D_{5/2} - 3D_{5/2}$ des relativistischen H-Atoms. Die Energieeinheit ist die Ruheenergie des Elektrons $m_e c^2 = 0.511 \text{ MeV}$.

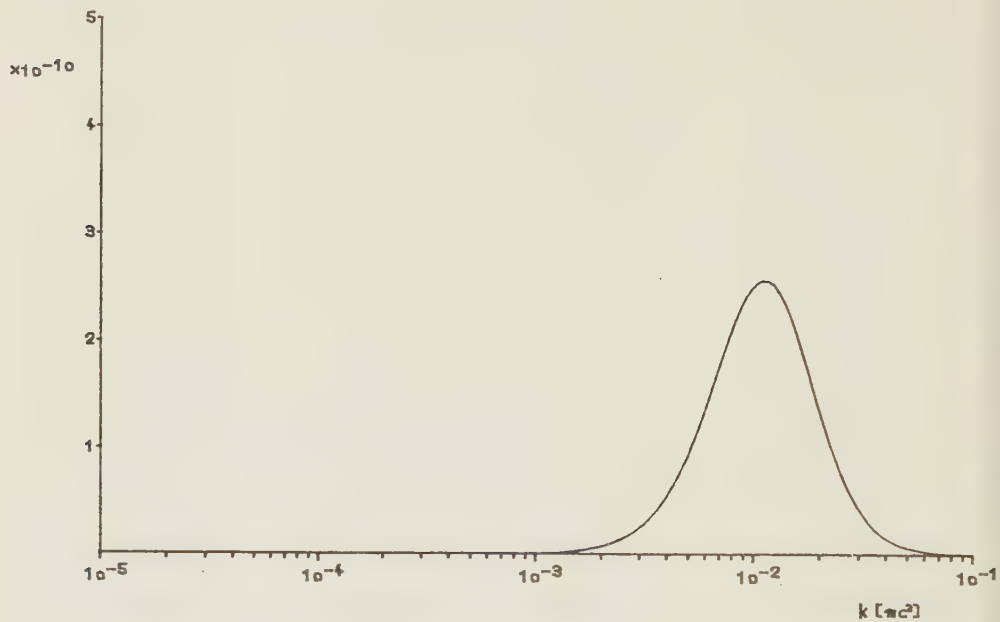
Die Zeichnungen der Funktionen $\bar{m}(a,b;k)$ und $\bar{m}(a,b;k)/k$ sind mit den Zuständen a-b in spektroskopischer Notation überschrieben; in der Beschriftung bezeichnet dann $M(k)$ die Funktion $\bar{m}(a,b;k)$. Die Ordinaten besitzen eine lineare, die Abszissen eine logarithmische Teilung. Zu beachten ist außerdem, daß die Ordinaten der einzelnen Zeichnungen unterschiedliche Maßstäbe aufweisen. Der Energieabstand Δ ist in den Zeichnungen eingetragen, falls er in den Bereich der gezeichneten Abszisse fällt, d.h. falls $\Delta \geq 10^{-5} m_e c^2 = 5.11 \text{ eV}$ ist. Die Energieeinheit für k und $M(k)$ ist wieder $m_e c^2$; $M(k)/k$ ist dimensionslos.

(NA, LA, JA) =	(NB, LB, JB) =	EPS(A, B) =	NORM(M(A, B)) =
(2 2 5/2)	(3 2 5/2)	7.208251'-12	1.269091' #7
(3 2 5/2)	(3 2 3/2)	1.295511'-12	7.071361' #8
(2 2 5/2)	(3 1 3/2)	2.165261'-12	7.686281' #8
(3 2 5/2)	(3 1 1/2)	5.629741'-13	4.304071' #8
(2 2 5/2)	(3 0 1/2)	7.065681'-13	4.595901' #8
(3 2 5/2)	(2 1 3/2)	7.621341'-12	1.266731' #7
(2 2 5/2)	(2 1 1/2)	3.534601'-13	4.171381' #8
(3 2 5/2)	(2 0 1/2)	1.095721'-12	6.296271' #8
(3 2 5/2)	(1 0 1/2)	2.942271'-13	4.239081' #8
(2 2 3/2)	(3 2 3/2)	4.805551'-12	1.166441' #7
(3 2 3/2)	(3 1 3/2)	7.977331'-13	6.381341' #8
(2 2 3/2)	(3 1 1/2)	1.041611'-12	6.073161' #8
(3 2 3/2)	(3 0 1/2)	4.786421'-13	4.595911' #8
(3 2 3/2)	(2 1 3/2)	5.539021'-12	1.415851' #7
(3 2 3/2)	(2 1 1/2)	7.829931'-12	1.260801' #7
(3 2 3/2)	(2 0 1/2)	2.661471'-12	9.233211' #8
(3 2 3/2)	(1 0 1/2)	8.999961'-13	7.981991' #8
(3 1 3/2)	(3 1 3/2)	2.712291'-12	9.849141' #8
(3 1 3/2)	(3 1 1/2)	5.356051'-13	5.437901' #8
(3 1 3/2)	(3 0 1/2)	9.800451'-13	6.195551' #8
(3 1 3/2)	(2 1 3/2)	5.851231'-12	1.774451' #7
(3 1 3/2)	(2 1 1/2)	1.683741'-12	1.086131' #7
(3 1 3/2)	(2 0 1/2)	3.727021'-12	1.143081' #7
(3 1 3/2)	(1 0 1/2)	8.827071'-12	2.115721' #7
(3 1 1/2)	(3 1 1/2)	1.356191'-12	8.212071' #8
(3 1 1/2)	(3 0 1/2)	4.330671'-13	6.193731' #8
(3 1 1/2)	(2 1 3/2)	2.614821'-12	1.314471' #7
(3 1 1/2)	(2 1 1/2)	2.787741'-12	1.458431' #7

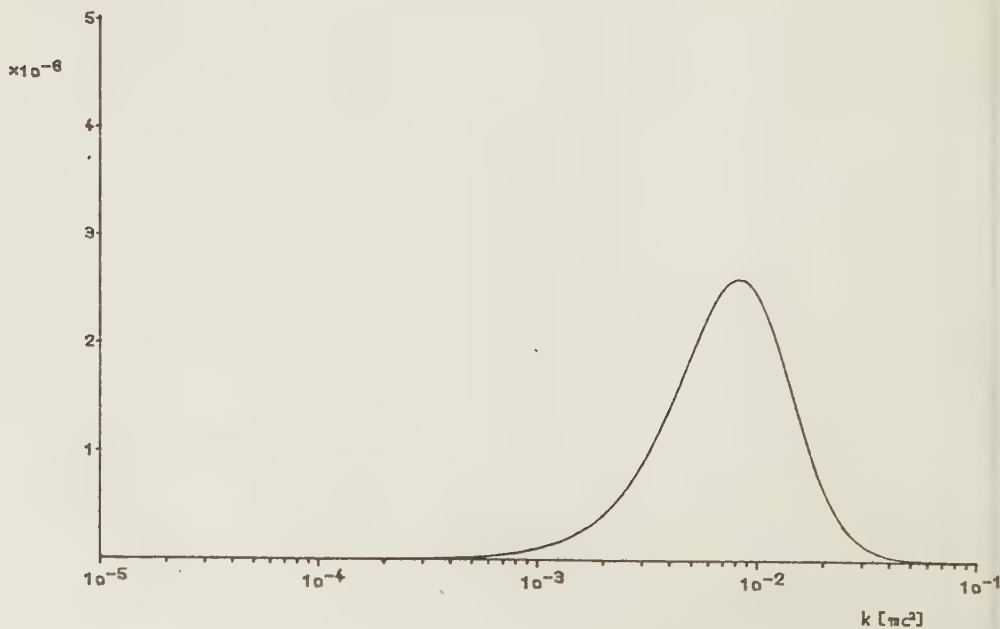
$(IA, LA, JA) =$	$(IB, LB, JB) =$	$EPS(A, B) =$	$NORM(M(A, B)) =$
(3 1 1/2)	(2 0 1/2)	3.657491-12	1.235741 -7
(2 1 1/2)	(1 0 1/2)	1.999081-11	3.660131 -7
(3 0 1/2)	(3 0 1/2)	6.837901-13	7.619061 -8
(3 0 1/2)	(2 1 3/2)	3.760901-12	1.473281 -7
(3 0 1/2)	(2 1 1/2)	1.331661-12	1.106811 -7
(3 0 1/2)	(2 0 1/2)	1.647951-12	1.392881 -7
(3 0 1/2)	(1 0 1/2)	1.003871-11	3.910461 -7
(2 1 3/2)	(2 1 3/2)	3.107721-11	3.615141 -7
(2 1 3/2)	(2 1 1/2)	5.846181-12	1.946821 -7
(2 1 3/2)	(2 0 1/2)	8.307761-12	2.045041 -7
(2 1 3/2)	(1 0 1/2)	3.328001-11	3.844231 -7
(2 1 1/2)	(2 1 1/2)	1.553921-11	3.046271 -7
(2 1 1/2)	(2 0 1/2)	4.154051-12	2.045101 -7
(2 1 1/2)	(1 0 1/2)	7.218041-11	6.610141 -7
(2 0 1/2)	(2 0 1/2)	6.923421-12	2.581821 -7
(2 0 1/2)	(1 0 1/2)	3.500951-11	7.214371 -7
(1 0 1/2)	(1 0 1/2)	3.544691-10	2.095571 -6

$$1S_{1/2} - 1S_{1/2}$$

$n(k) [\pi c^2]$

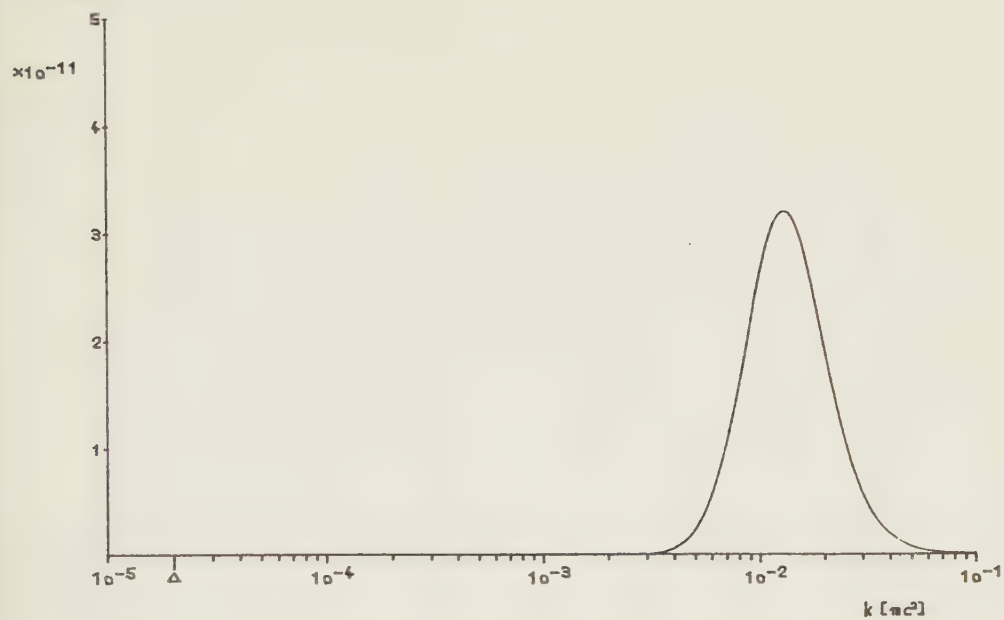


$n(k) / k$

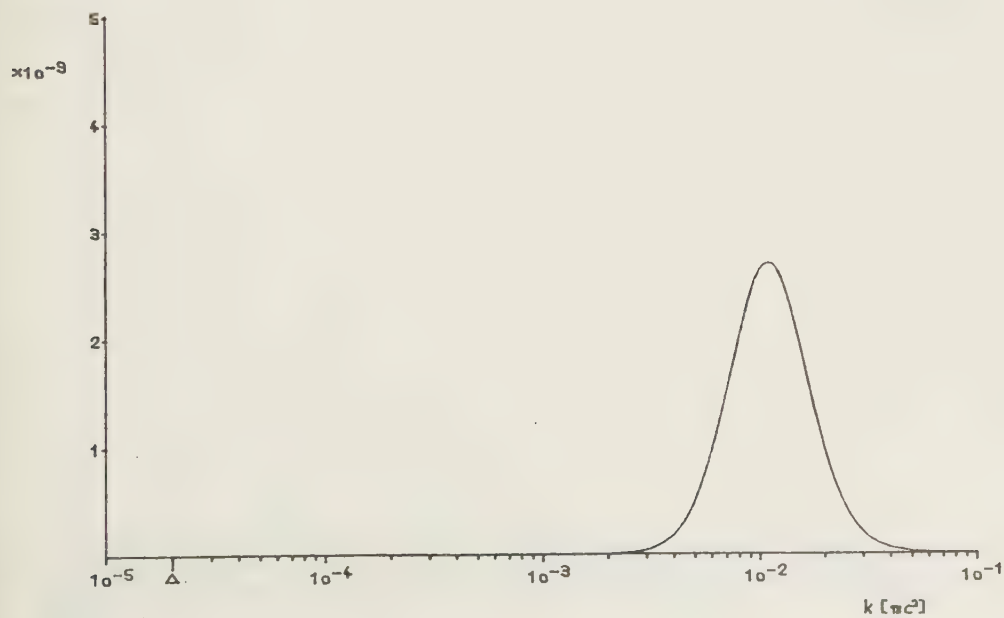


$$2S_{1/2} - 1S_{1/2}$$

$\Pi(k) [\text{mc}^2]$

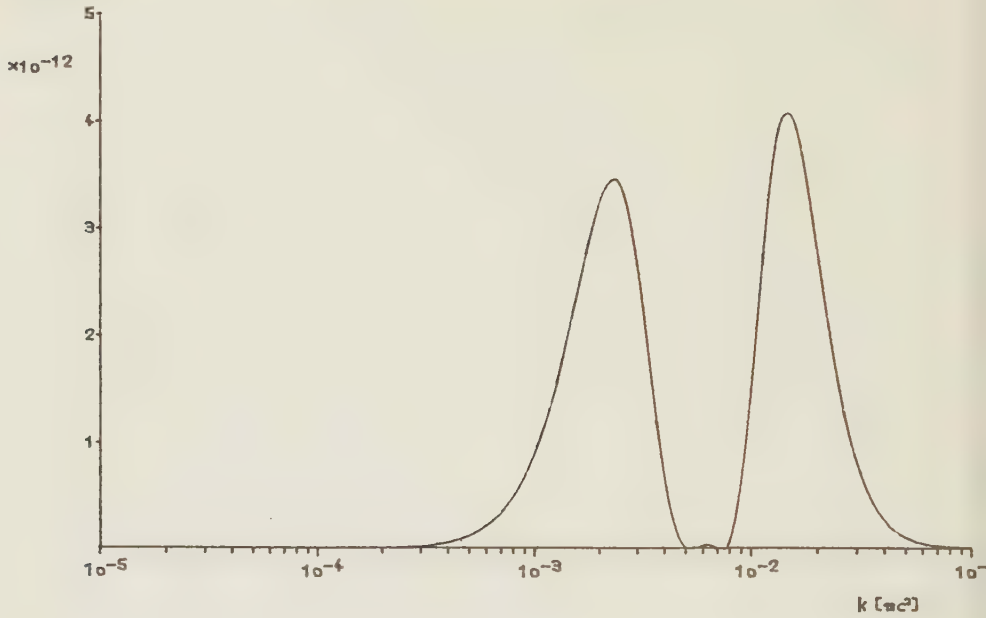


$\Pi(k) / k$

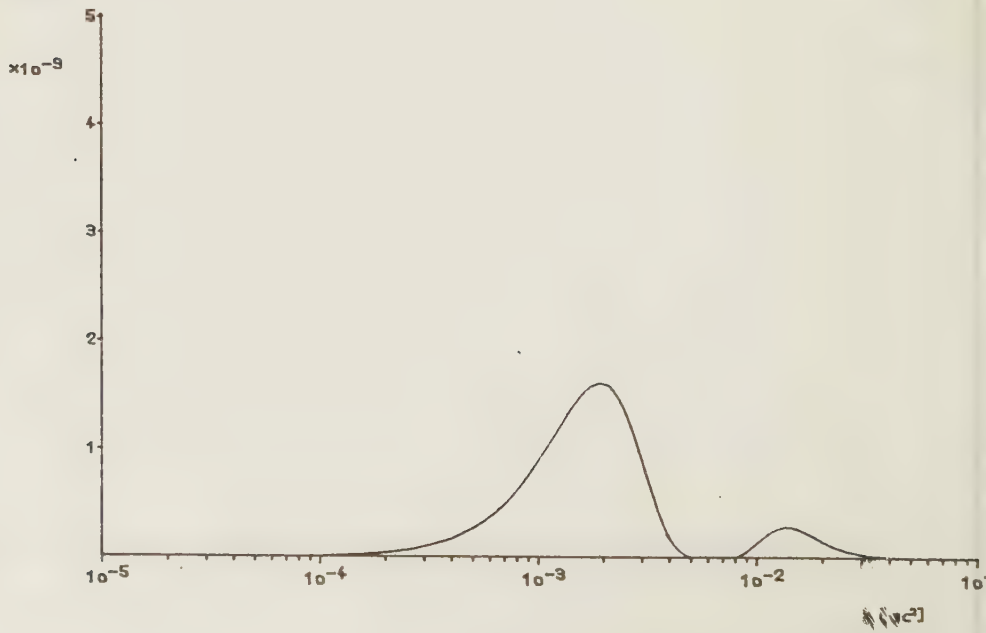


$$2S_{1/2} - 2S_{1/2}$$

$\Pi(k) [\pi c^2]$

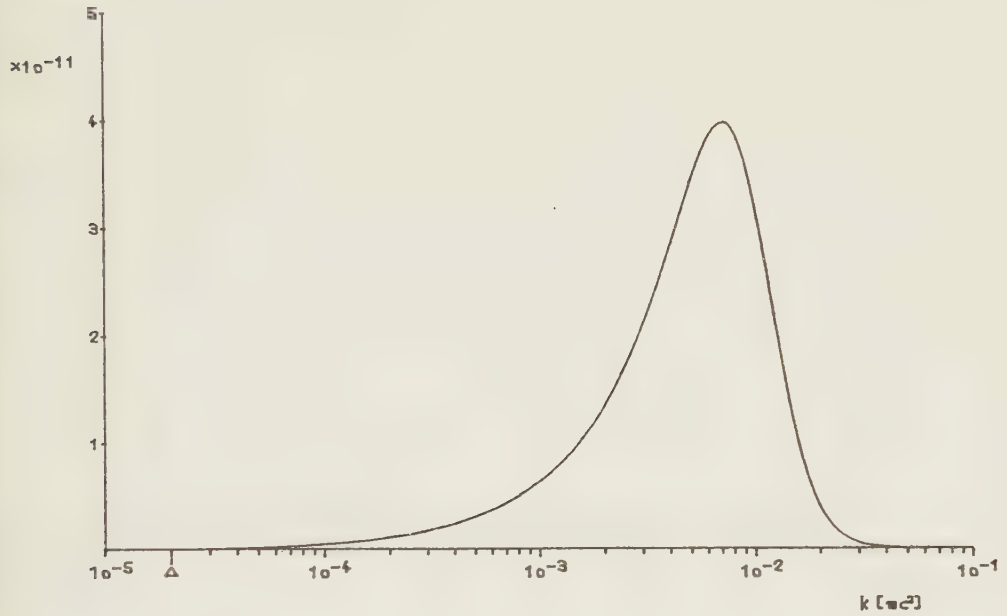


$\Pi(k)/k$

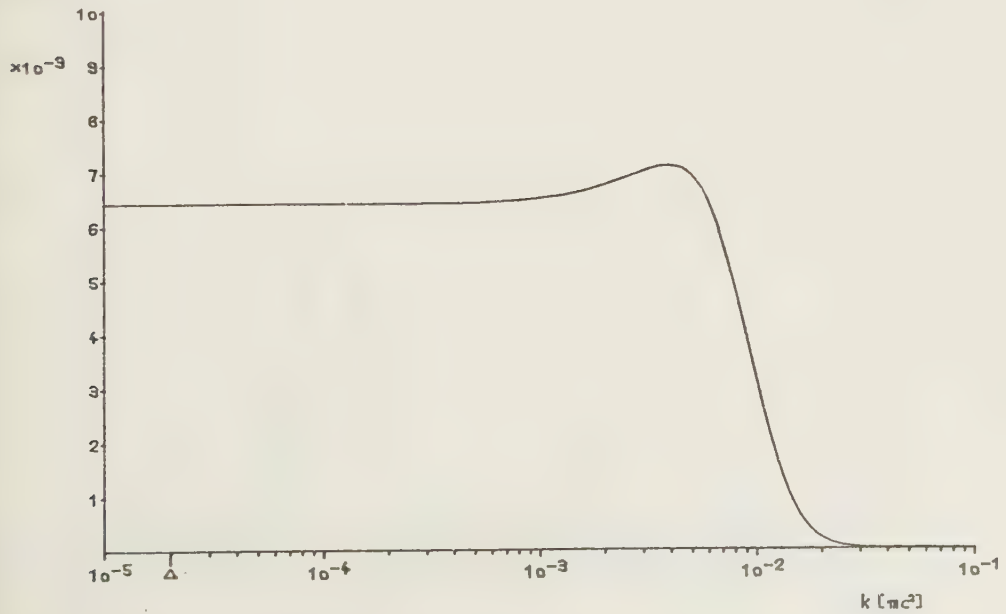


$$2P_{1/2} - 1S_{1/2}$$

$\Pi(k) [\text{mc}^2]$

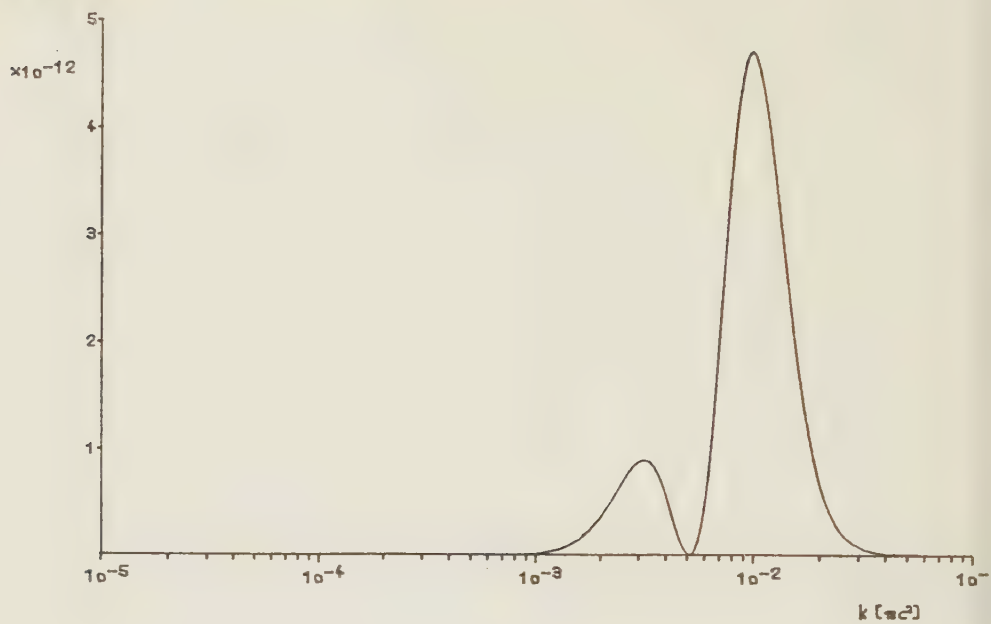


$\Pi(k)/k$

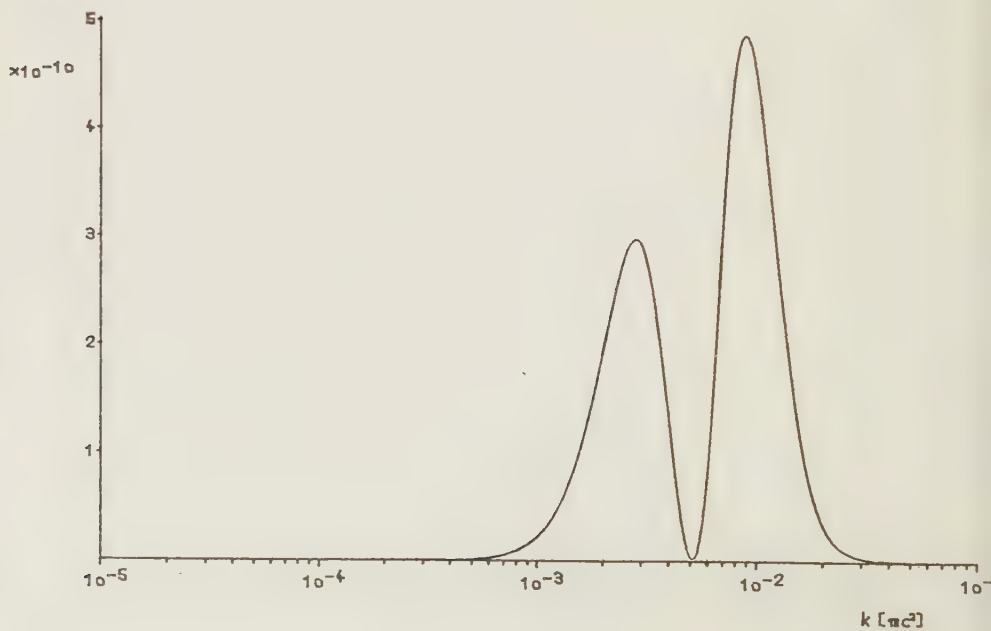


$$2P_{1/2} - 2S_{1/2}$$

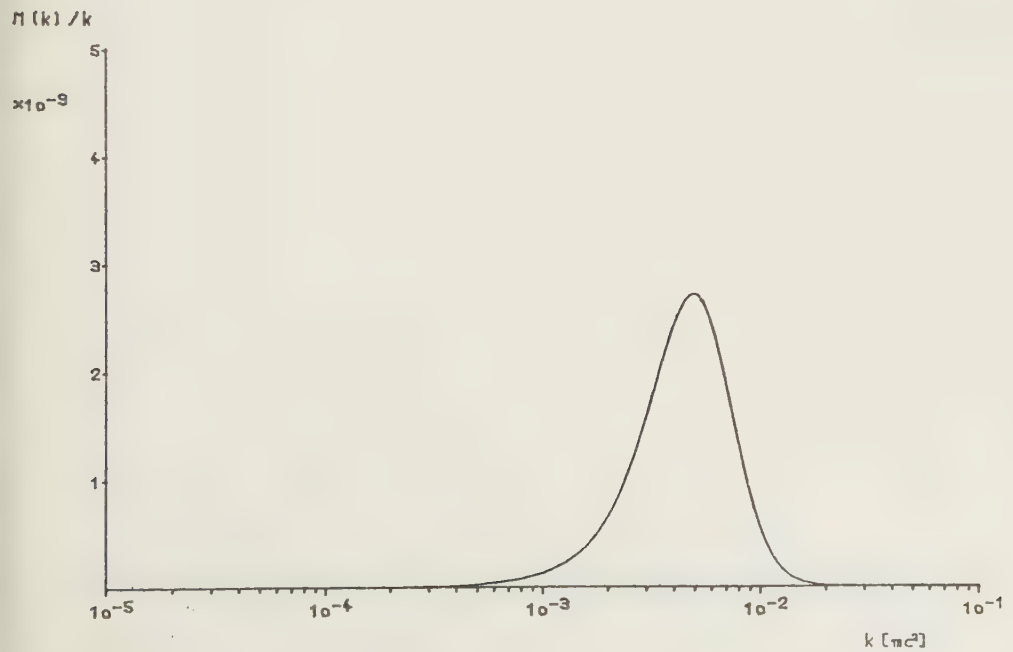
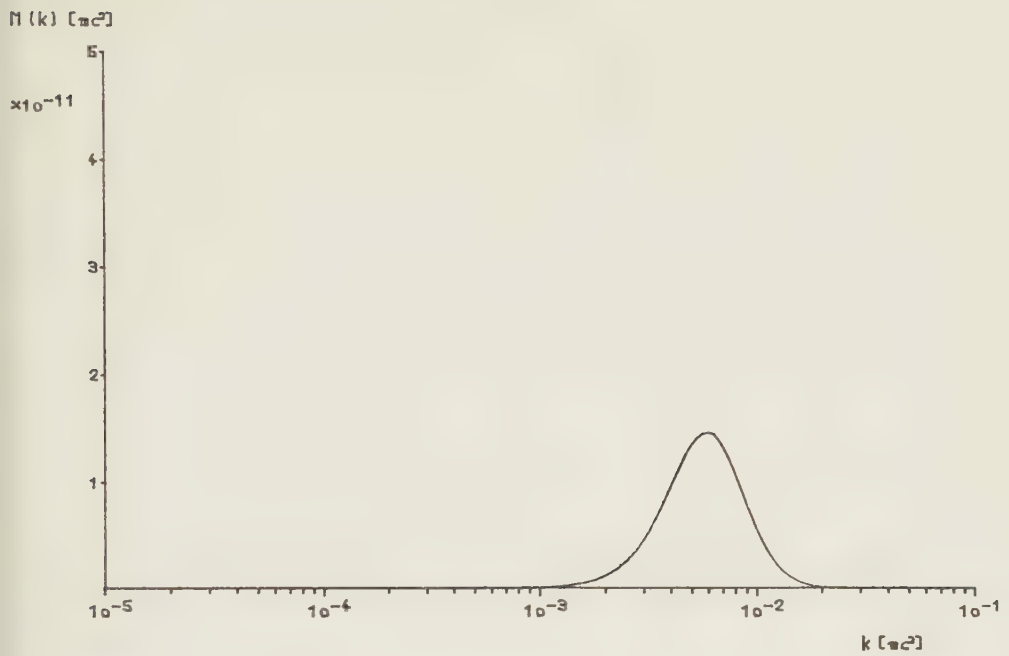
$\Pi(k) [\pi^2]$



$\Pi(k) / k$

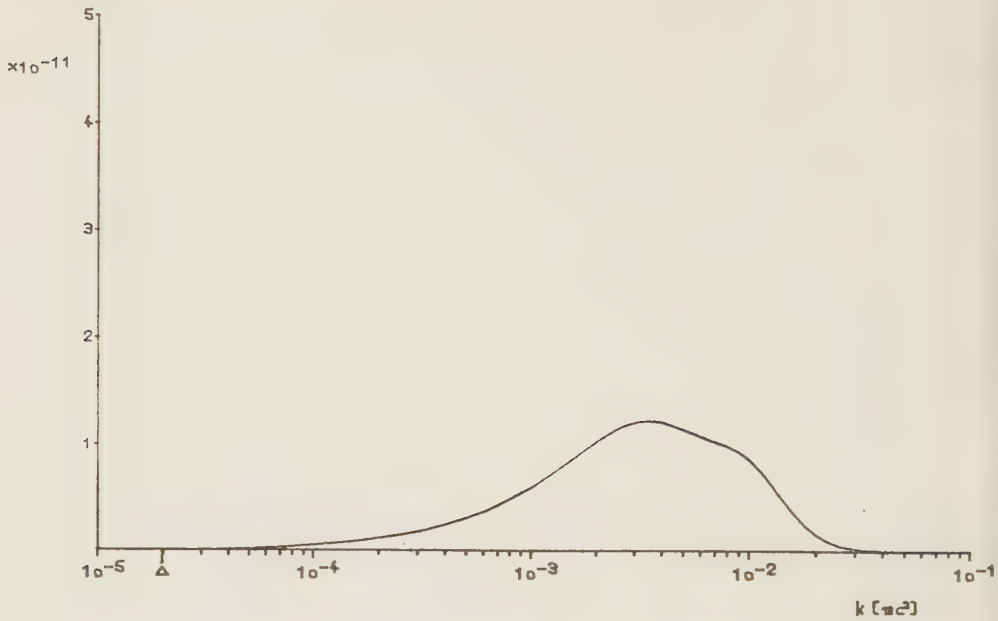


$$2P_{1/2} - 2P_{1/2}$$

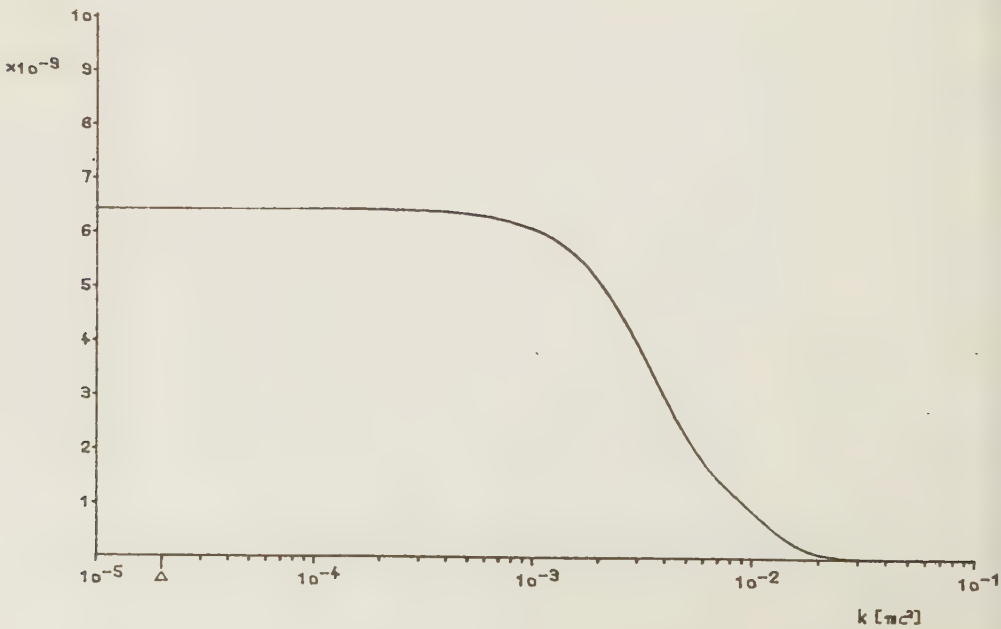


$$2P_{3/2} - 1S_{1/2}$$

$\Pi(k) [\pi^2]$

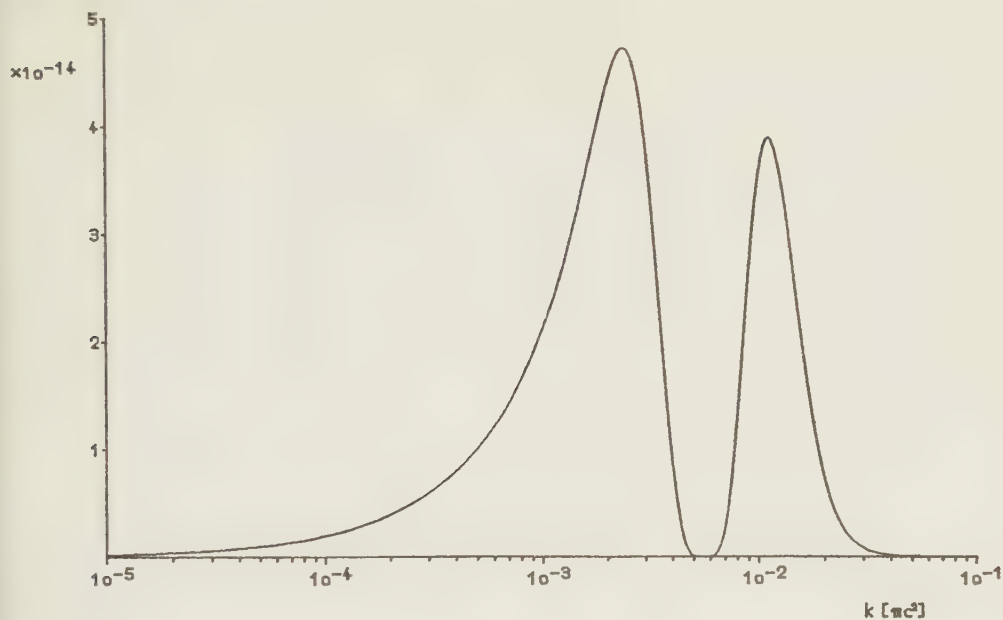


$\Pi(k) / k$

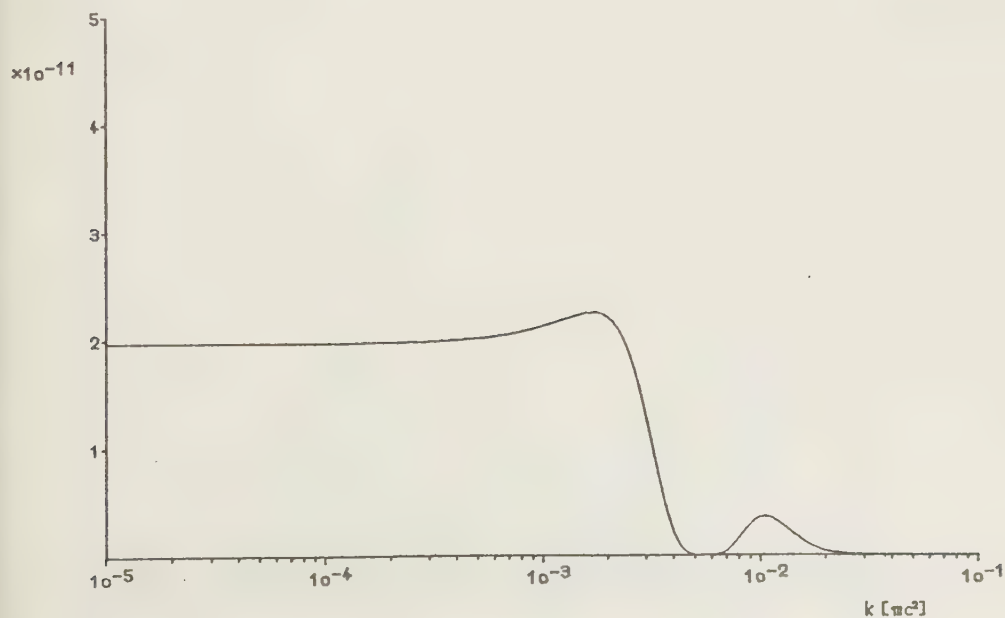


$$10P_{1/2} - 2S_{1/2}$$

$M(k) [m^2]$

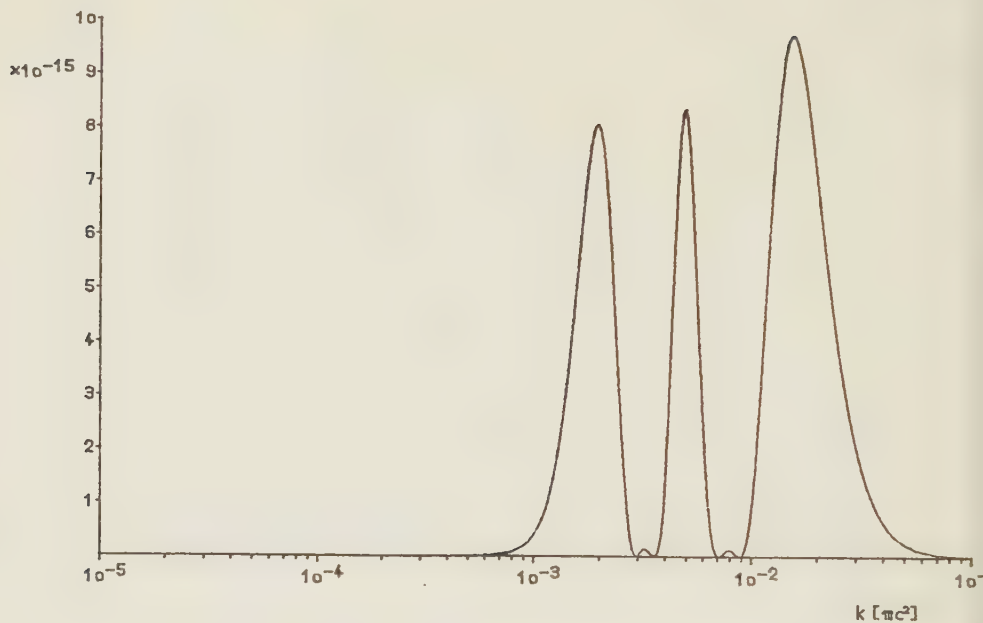


$M(k)/k$

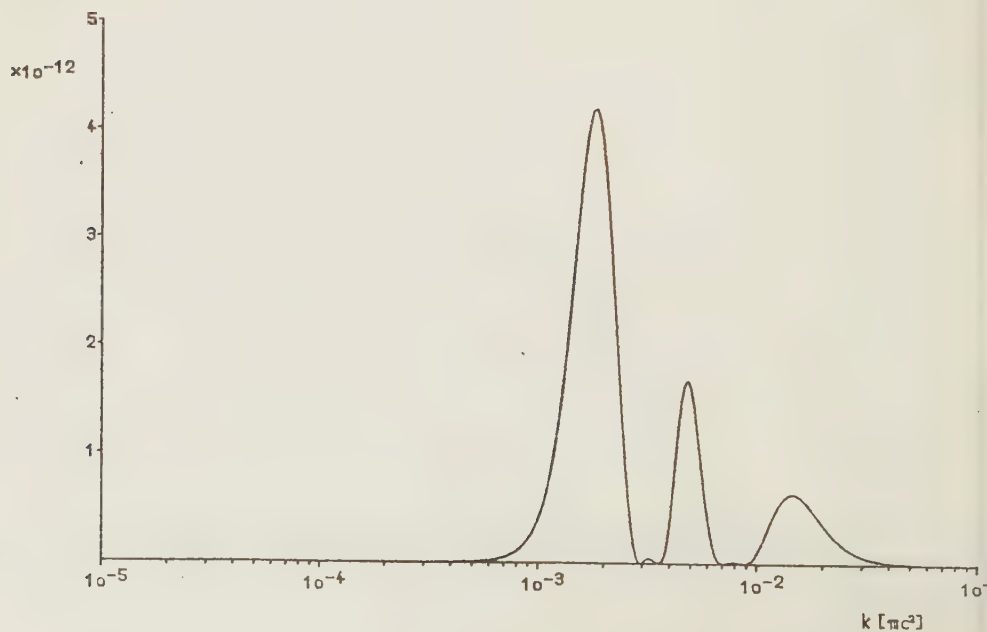


$10S_{1/2} - 3S_{1/2}$

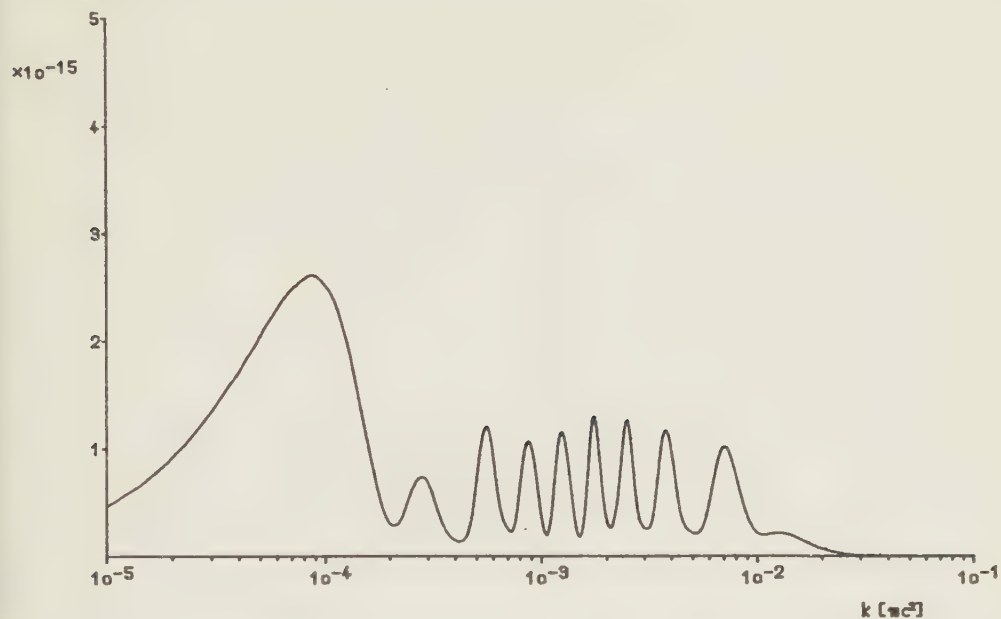
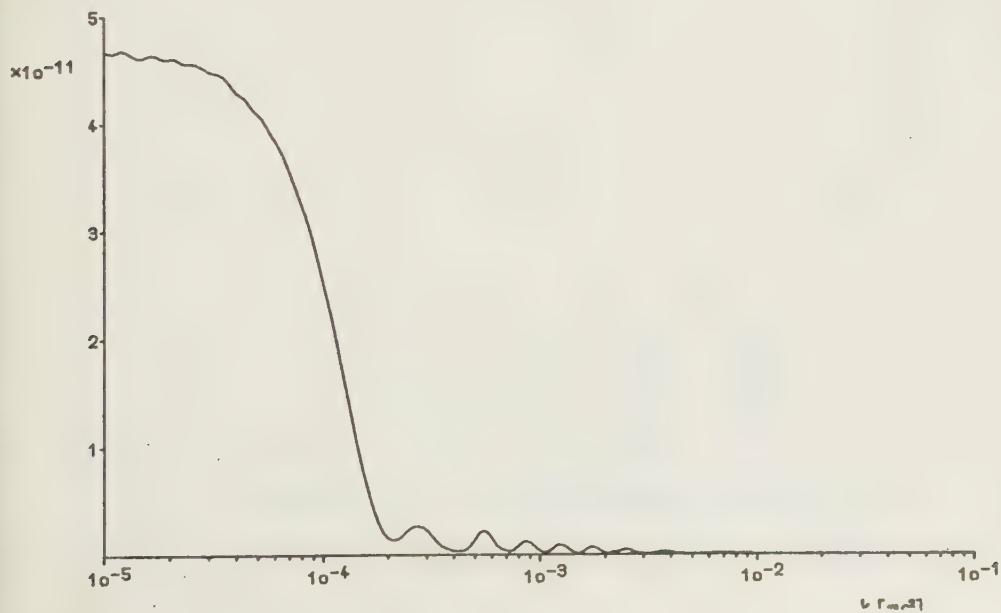
$M(k) [\text{m}^2]$



$M(k) / k$

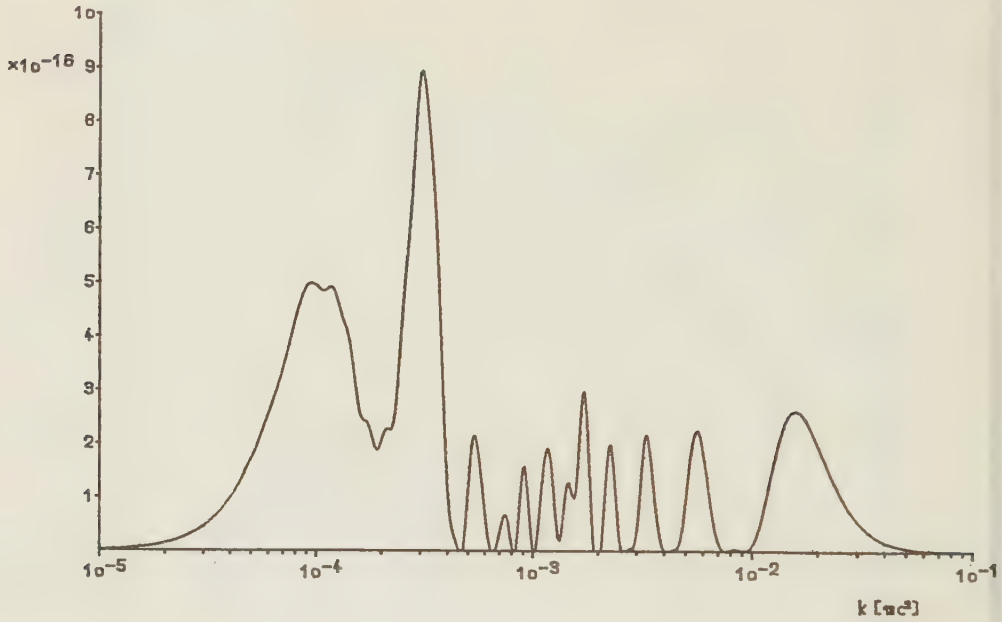


$$10S_{1/2} - 9P_{3/2}$$

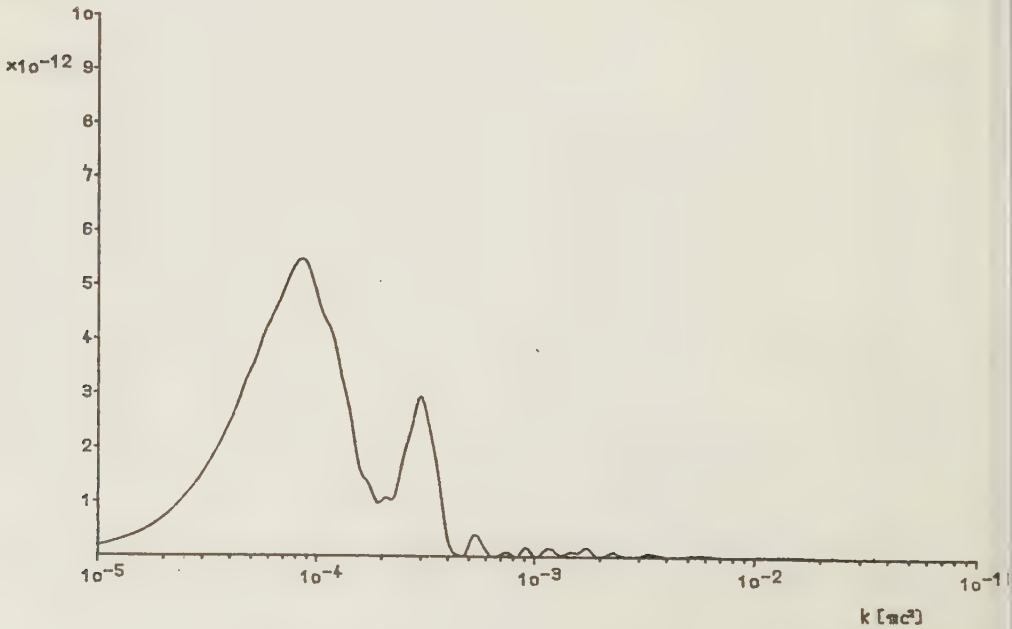
 $M(k) [mc^2]$

 $M(k)/k$


$$10S_{1/2} - 10S_{1/2}$$

$M(k) [mc^2]$



$M(k) / k$



Literatur

1. Dirac, P.A.M.: Z.Physik 44, 585-595 (1927)
2. Weisskopf, V., Wigner, E.: Z.Physik 63, 54-73 (1930)
3. Low, F.E.: Phys.Rev. 88, 52-57 (1952)
4. Källén, G.: Encyclopedia of Physics, Vol V/1, p.274. Berlin-Göttingen-Heidelberg: Springer 1958
5. Louisell, W.H.: Quantum Statistical Properties of Radiation. New York: Wiley 1973
6. Goldberger, M.L., Watson, K.M.: Collision Theory. New York-London: Wiley 1964
7. Heitler, W.: The Quantum Theory of Radiation. Oxford: Clarendon 1954
8. Agarwal, G.S.: Springer Tracts in Modern Physics, Vol.70. Berlin-Heidelberg-New York: Springer 1974
9. Mower, L.: Phys.Rev. 142, 799-816 (1966)
10. Ernst, V., Stehle, P.: Phys. Rev. 176, 1456-1479 (1968)
11. Höhler, G.: Z.Physik 152, 546-565 (1958)
12. Grimm, E., Ernst, V.: J.Phys.A 7, 1664-1675 (1974)
13. Grimm, E., Ernst, V.: J.Phys.A , in Vorbereitung
14. Weisskopf, V.: Ann.Phys.(Leipzig) 9, 23-66 (1931)
15. Davidson, R., Kozak, J.J.: J.Math.Phys. 11, 189-202, 1420-1436 (1970); 12, 903-917 (1971); 14, 414-421, 423-431 (1973); 15, 491-501 (1974)
16. Swain, S.: J.Phys.A 5, 1587-1600, 1601-1618 (1972)
17. Ingólfsson, K.: Helv.Phys.Acta 40, 237-263 (1967); Comm.Math.Phys. 11, 168-180 (1968)
18. Grimm, E., Ernst, V.: Z.Physik A 274, 293-303 (1975)
19. Grimm, E.: Diplomarbeit, Universität München 1972

20. Schuda, F., Stroud Jr., C.R., Hercher, M.: J. Phys. B 7,
L198-L202 (1974)
Wu, F.Y., Grove, R.E., Ezekiel, S.: Phys. Rev. Lett. 35,
1426-1429 (1975)
Walther, H.: In: Laser Spectroscopy, p.358-369, Lecture Notes
in Physics Vol.43. Berlin-Heidelberg-New York:
Springer 1975
21. Kato, T.: Perturbation Theory for Linear Operators. Berlin-
Heidelberg-New York: Springer 1966
22. Oppenheimer, J.R.: Phys. Rev. 35, 585-595
23. Friedrichs, K.O.: Comm. Pure Appl. Math. 1, 361 (1948)
24. Friedrich, M.: Comm. Math. Phys. 2, 327-353 (1966)
25. Evans, W.D.: Proc. London Math. Soc. (3) 20, 537-557 (1970)
26. Schmincke, U.-W.: Math. Z. 126, 71-81 (1972)
27. Schmincke, U.-W.: Math. Z. 129, 335-349 (1972)
28. Kalf, H., Schmincke, U.-W., Walter, J., Wüst, R.: In: Spectral
Theory and Differential Equations, p.182-226, Lecture
Notes in Mathematics Vol.448. Berlin-Heidelberg-New York:
Springer 1975
29. Schmincke, U.-W.: Math. Z. 131, 351-356 (1973)
30. Weidmann, J.: In: Spectral Theory and Differential Equations,
p.71-111, Lecture Notes in Mathematics Vol.448. Berlin-
Heidelberg-New York: Springer 1975
31. Cook, J.M.: Trans. Am. Math. Soc. 74, 222-245 (1953)
32. Schroeck Jr., F.E.: J. Math. Phys. 12, 1849-1857 (1971)
33. Kastler, D.: Introduction à l'électrodynamique quantique.
Paris: Dunod 1961
34. Ernst, V.: In Vorbereitung

35. Berezanski, Ju.M.: Expansions in Eigenfunctions of Selfadjoint Operators. Translations of Mathematical Monographs Vol.17. Providence, Rhode Island: Amer.Math.Soc. 1968
36. Nelson, E.: J.Math.Phys. 5, 1190-1197 (1964)
37. Yosida, K.: Functional Analysis. Berlin-Heidelberg-New York: Springer 1966
38. Gottfried, K.: Quantum Mechanics. New York: Benjamin 1966
39. Edmonds, A.R.: Angular Momentum in Quantum Mechanics. Princeton: Princeton University 1957
40. Prugovecki, E.: Quantum Mechanics in Hilbert Space. New York-London: Academic 1971
41. Amrein, W.O., Georgescu, V., Jauch, J.M.: Helv.Phys.Acta 44, 407-434 (1971)
42. Ernst, V.: Z.Physik B 23, 103-111, 113-125 (1975)
43. Rose, E.M.: Relativistic Electron Theory. New York-London: Wiley 1961
44. Luke, Y.L.: The Special Functions and their Approximations. New York-London: Academic 1969
45. Erdélyi, A.(Ed.): Tables of Integral Transforms Vol.1, p.327. New York-Toronto-London: McGraw-Hill 1954
46. Mathai, A.M., Saxena, R.K.: Generalized Hypergeometric Functions with Applications in Statistics and Physical Sciences, p.307. Lecture Notes in Mathematics Vol.348. Berlin-Heidelberg-New York: Springer 1973
47. Erdélyi, A.(Ed.): Higher Transcendental Functions Vol.1, p.112, 2.11(16). New York-Toronto-London: McGraw-Hill 1953
48. Matsunobu, H., Takebe, H.: Progr.Theoret.Phys.14, 589-605(1955)
49. Wie 47 , S.103

Herrn Priv. Doz. Dr. V. Ernst danke ich für die Betreuung dieser Arbeit und für wertvolle Diskussionsbeiträge. Herrn Prof. Dr. F. Bopp danke ich für die freundliche Unterstützung und die Bereitstellung von Institutsmitteln.

Der Bayerischen Akademie der Wissenschaften danke ich für die Benutzungserlaubnis der Rechenmaschine TR 440 des Leibniz-Rechenzentrums. Ferner sei den Herrn Dr. M. Stelzer und Dipl. Phys. J. Mühlstein für zahlreiche interessante Anregungen zu dieser Arbeit gedankt.

Lebenslauf

Am 13.3.1946 wurde ich als Sohn des Photographen Eugen Grimm und dessen Ehefrau Magdalena in München geboren.

Ich wuchs in München auf und legte 1966 am Gisela-Gymnasium die Reifeprüfung ab.

Im Wintersemester 1966/67 begann ich an der Universität München das Studium der Physik und schloß es im Oktober 1972 mit der Diplom-Hauptprüfung ab. Die Diplomarbeit über die "Verschiebung der $2S_{1/2}$ - und $2P_{1/2}$ -Zustände des H-Atoms in Weisskopf-Wigner-Näherung" fertigte ich am Lehrstuhl für Theoretische Physik, Prof. Dr. F. Bopp, unter der Betreuung von Herrn Priv. Doz. Dr. V. Ernst an.

Seit 1.4.1973 bin ich an der Sektion Physik am Lehrstuhl Prof. Dr. F. Bopp als Verwalter der Dienstgeschäfte eines wissenschaftlichen Assistenten tätig. Während dieser Zeit entstand die vorliegende Dissertation.

Ich bin verheiratet und habe 3 Kinder.

